

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

INTÉGRER LA SPÉCIATION DES MÉTAUX EN ÉCOTOXICITÉ TERRESTRE  
POUR L'ANALYSE DU CYCLE DE VIE : LE CAS DU ZINC

GENEVIÈVE PLOUFFE

DÉPARTEMENT DE GÉNIE CHIMIQUE  
ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

THÈSE PRÉSENTÉE EN VUE DE L'OBTENTION  
DU DIPLÔME DE PHILOSOPHIAE DOCTOR  
(GÉNIE CHIMIQUE)

DÉCEMBRE 2014

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

Cette thèse intitulée:

INTÉGRER LA SPÉCIATION DES MÉTAUX EN ÉCOTOXICITÉ TERRESTRE POUR  
L'ANALYSE DU CYCLE DE VIE : LE CAS DU ZINC

présentée par : PLOUFFE Geneviève

en vue de l'obtention du diplôme de : Philosophiae Doctor

a été dûment acceptée par le jury d'examen constitué de :

M. SAVADOGO Oumarou, D.d'état, président

Mme DESCHÊNES Louise, Ph.D., membre et codirectrice de recherche

Mme BULLE Cécile, Ph.D., membre et codirectrice de recherche

M. MARGNI Manuele, Doctorat, membre

M. HENDERSON Andrew D., Ph.D., membre externe

## DÉDICACE

*À mon grand-père, Raymond Plouffe, Po.1951 (1929-2010)*

*Et à mes quatre petits clowns adorés, Solène, Gabriel, Florent et Mathilde*

## REMERCIEMENTS

Tout d'abord, je tiens à remercier mes directrices. Louise et Cécile, merci pour votre soutien, pour vos conseils judicieux, et surtout pour votre patience et votre ouverture. Ce ne sont pas tous les directeurs de recherche qui auraient accueilli avec autant de bienveillance, quatre naissances pendant un doctorat...Merci, merci, merci et merci.

Merci à Isabelle Lessard, Pierre-Olivier Roy et Pablo Tirado Seco pour vos données, votre aide, votre temps et vos conseils. Merci également à tout les gens du CIRAIG. Malgré mes nombreuses absences, votre accueil a toujours été très chaleureux.

Merci infiniment à ma famille pour votre soutien incommensurable, votre temps et votre patience. Merci plus spécialement à mes parents. Merci pour toutes les fois où vous avez gardé mes enfants, pour tous les soupers et les retours d'école et de garderie que vous avez pris en charge pour que je puisse avoir régulièrement quelques heures pour me concentrer plus facilement. Merci d'avoir joué les gardiens jusqu'à Berlin pour que je puisse présenter mes résultats dans une conférence. Si je me suis rendue au bout, c'est en grande partie grâce à vous. Merci également à ma belle-mère d'avoir traversé l'Atlantique et séjourné avec nous cette année pour me permettre de terminer à temps.

Merci à mes enfants, Solène, Gabriel, Florent et Mathilde, qui, par leur arrivée, ont à la fois ralenti et bonifié le cours de ce projet. Même si cela vous a parfois ennuyé que « Maman travaille pour son doctorat... », c'est grâce à la flexibilité du doctorat que j'ai pu passer autant de moments merveilleux avec vous. Pendant ces sept ans, vous m'avez souvent permis de décrocher de mon projet...pour pouvoir mieux y revenir...

Et pour terminer, merci à mon mari. Amaury, merci de m'avoir soutenue, supportée et même portée parfois pendant ce long parcours. Grâce à toi, cette traversée des Rocheuses comme tu le dis si bien a été merveilleuse à tous points de vue. À mon allié indéfectible, à mon amour, merci, merci pour tout.

## RÉSUMÉ

L'analyse du cycle de vie (ACV) est une méthode comparative globale qui vise à déterminer les impacts environnementaux d'un produit, service ou procédé. Dans cette méthode des scores d'impacts obtenus pour chacune des catégories d'impacts considérées (ex. changements climatiques, occupation des terres, toxicité humaine et écotoxicité) en multipliant la masse totale d'une substance par un facteur de caractérisation (FC) correspondant sont comparés. Ces facteurs, propres à chaque substance et à chaque catégorie d'impacts sont issus de la modélisation. Pour la catégorie d'impact écotoxicité, les modèles tiennent compte du devenir de la substance émise dans différents compartiments environnementaux et de l'effet écotoxique de cette substance sur des récepteurs écologiques en découlant. L'évaluation des impacts écotoxicologiques des métaux pose problème en ACV, puisque les modèles développés initialement pour les composés organiques sont appliqués sans distinction aux métaux, alors que leurs propriétés diffèrent grandement. En effet, contrairement aux composés organiques, les métaux se répartissent sous plusieurs formes en fonction des conditions physicochimiques de l'environnement. Cette spéciation détermine la fraction biodisponible qui est susceptible d'engendrer un effet écotoxique. Or la spéciation des métaux n'est pas prise en compte dans les modèles en ACV, ce qui engendre une domination des impacts liés aux métaux en écotoxicité non reliée à une toxicité réelle. En réponse à cela, les analystes ACV tendent à écarter les émissions de métaux ou les impacts écotoxicologiques de leurs résultats, entraînant, par le fait même, un sérieux problème de crédibilité.

Dans la dernière décennie, les lacunes de l'ACV concernant le traitement des métaux ont été reconnues par deux groupes de travail de l'initiative sur le cycle de vie du Programme des Nations Unies pour l'Environnement (PNUE) et de la *Society of Environmental Toxicology and Chemistry* (SETAC). Ces groupes ont notamment proposé un cadre méthodologique permettant d'inclure la spéciation des métaux dans les eaux douces dans la définition du FC en insérant un facteur de biodisponibilité (FB), qui représente la fraction biodisponible obtenue par l'utilisation d'un modèle géochimique de spéciation, et en tenant compte de la variabilité spatiale des paramètres physicochimiques influençant la spéciation par la création d'archétypes d'eaux douces de mêmes propriétés. Ces recommandations ont permis l'obtention de FC pour l'écotoxicité aquatique des eaux douces regroupées en 7 archétypes pour 14 métaux cationiques.

L'utilisation de modèle géochimique de spéciation n'est pas forcément applicable aux sols, les modèles étant développés pour les milieux aquatiques et les hypothèses ne s'appliquant pas nécessairement à des milieux aussi hétérogènes que les sols. De plus, la complexité des sols et l'interconnexion des paramètres physicochimiques d'influence peuvent compliquer l'utilisation d'archétypes. Pour cette raison, une autre méthode, soit l'emploi de relations empiriques pour obtenir le FB, a été proposée pour les sols pour intégrer la spéciation du nickel (Ni) et du cuivre (Cu) dans les FC. Or, les relations empiriques sont généralement applicables uniquement aux sols ayant servi à les obtenir, ce qui limite leur généralisation et leur applicabilité dans une méthode globale comme l'ACV. De plus, la définition d'archétypes de sols n'a pas encore été testée pour ce contexte.

L'objectif de ce projet est donc de générer des nouveaux FC régionalisés pour le zinc (Zn) qui tiennent compte de la spéciation pour l'écotoxicité terrestre. Le projet vise à remplir les objectifs spécifiques suivants : 1. Déterminer la biodisponibilité du Zn dans les sols à l'échelle globale avec des données sur les sols limitées à celles présentes dans les bases de données mondiales sur les sols. 2. Calculer des FCs régionalisés pour le Zn qui illustrent à la fois la variabilité spatiale de la biodisponibilité du Zn et qui puissent être directement intégrés aux méthodes ACV. 3. Tester l'importance d'intégrer la spéciation de Zn en écotoxicité terrestre en ACV en réalisant une étude de cas. Le Zn a été choisi dans ce projet notamment parce qu'il est l'un des principaux contributeurs à l'empreinte écologique du Canada et du monde pour l'écotoxicité terrestre et aussi en raison de la disponibilité des données de terrain sur sa spéciation dans les sols.

*1. Calculer la fraction biodisponible de Zn à l'échelle globale avec des données limitées sur les sols*

Le premier objectif spécifique de ce projet visait à obtenir la biodisponibilité du Zn dans les sols à l'échelle globale en utilisant uniquement les propriétés physicochimiques des sols disponibles dans les bases de données mondiales sur les sols. En ACV, les émissions de métaux pouvant se produire partout dans le monde, il est nécessaire d'utiliser une méthode cohérente à l'échelle mondiale. Cet objectif a mené à la rédaction du premier manuscrit intitulé "*Assessing the variability of the bioavailable fraction of zinc at the global scale using geochemical modeling and soil archetypes*" publié dans la revue *The International Journal of Life Cycle Assessment*

(chapitre 3)[1]. La fraction biodisponible du Zn y est déterminée pour l'ensemble des sols du monde en utilisant le modèle géochimique de spéciation WHAM 6.0 (Windermere humic aqueous model) et la base de données *Harmonized World Soil Database* (HWSD). La première étape consistait à valider avec des données de terrain l'applicabilité du modèle WHAM 6.0 pour les sols en utilisant uniquement les propriétés des sols disponibles à l'échelle globale, soit le pH du sol, la capacité d'échange cationique (CEC), le contenu en matière organique (OM) et en carbonates et la texture du sol. Cette méthode a été comparée avec l'utilisation de relations empiriques.

Les résultats associés à cet objectif, présentés au chapitre 3, indiquent qu'il a été possible de prédire la fraction biodisponible du Zn avec une incertitude en deçà de 2 ordres de grandeur pour une majorité de sols en comparaison avec des données de terrain, les prédictions étant dans le même ordre de grandeur pour 41% des échantillons. Les estimations obtenues grâce au modèle WHAM 6.0 se sont avérées plus proches des valeurs mesurées en termes de valeur et de rang que celles déterminées avec des régressions empiriques. Les FB obtenus pour les sols du monde présentent une variabilité de 6 ordres de grandeur lorsque le Zn soluble est considéré comme étant la fraction biodisponible et de 18 ordres de grandeur en utilisant le Zn vraiment dissout (ions et paires d'ions). Les sols du monde ont été regroupés en 231 archétypes définis à partir de propriétés clés influençant la spéciation du Zn qui sont disponibles à grande échelle (texture, pH, CEC, contenus en OM et en carbonates) afin d'évaluer l'étendue du processus de validation. Les données de terrain utilisées pour valider l'utilisation du modèle WHAM 6.0 dans ce contexte couvrent 29 archétypes et représentent 25% des unités de sols de la HWSD. Il a été possible de conclure que l'utilisation du modèle WHAM 6.0 semble fournir une estimation de la fraction biodisponible plus représentative de la réalité que les régressions empiriques, que le Zn soluble calculé avec le modèle WHAM 6.0 constitue un indicateur plus fiable que le Zn vraiment dissout pour la fraction biodisponible et que, vu l'étendue du processus de validation, cette méthode semble intéressante pour étudier la biodisponibilité du Zn à grande échelle dans les sols.

## 2. Obtenir des FC régionalisés pour le Zn qui tiennent compte de la spéciation

Suite à cette étape, les FB ont été intégrés dans le calcul des FC pour le Zn pour l'écotoxicité terrestre et le niveau de régionalisation requis pour représenter adéquatement la variabilité spatiale des FC a été défini. Ceci a mené à la rédaction du deuxième manuscrit intitulé

“*Characterization factors for zinc terrestrial ecotoxicity including speciation*” soumis à la revue *The International Journal of Life Cycle Assessment* (chapitre 4). Tout d’abord, des facteurs de devenir (FD) ont été déterminés à partir du modèle USEtox et de coefficients de partition ( $K_d$ ) spécifiques obtenus avec le modèle WHAM 6.0. Puis, des facteurs d’effet (FE) ont été calculés en utilisant la méthode AMI (Assessment of mean impact) avec des données écotoxicologiques terrestres ( $EC_{50}$ ) disponibles dans les bases de données écotoxicologiques. Pour ce faire, plusieurs scénarios ont été testés afin de rester le plus cohérent possible avec les FB malgré le manque de précision associé aux données écotoxicologiques, notamment en ce qui a trait aux sols utilisés pour les tests écotoxicologiques. La définition des archétypes de sols établie à l’étape antérieure a été précisée afin de mieux représenter la variabilité spatiale des FC obtenus et pour obtenir une résolution spatiale plus facile à gérer pour l’ACV. Afin de prendre en compte aussi les cas où les lieux d’émissions ne sont pas connus, comme c’est souvent le cas en ACV, des valeurs génériques de FC ont été obtenues en utilisant la densité de population comme proxy d’émission de Zn. Les résultats sont ensuite représentés sous forme de carte du monde pour faciliter leur utilisation.

Les résultats, présentés au chapitre 4, indiquent qu’une valeur générique de FC pourrait être suffisante pour représenter l’ensemble des sols du monde lorsque le FB est défini en termes du Zn soluble, les FC se situant tous dans un intervalle de 1,76 ordre de grandeur. Ceci n’est pas le cas lorsque le Zn vraiment dissout est utilisé, les FC variant de 14 ordres de grandeur (5,45 ordres de grandeur pour un intervalle de confiance de 95%) pour les sols du monde. Afin de représenter cette variabilité spatiale, les sols ont été groupés en 518 archétypes, la condition pour définir un archétype étant de présenter une variabilité des FC à l’intérieur d’un même archétype inférieure à deux ordres de grandeur. Cette condition est respectée pour 83% des archétypes (85% avec un intervalle de confiance de 95%). Pour faciliter la gestion des archétypes, 13 groupes d’archétypes ont été créés en fonction de la valeur médiane des FC pour chaque archétype. Les valeurs génériques calculées avec le proxy d’émissions sont de  $4,7 \text{ PAF} \cdot \text{m}^3 \cdot \text{d} \cdot \text{kg}^{-1}$  (PAF : potentially affected fraction of species) pour le Zn soluble et  $1,45 \text{ PAF} \cdot \text{m}^3 \cdot \text{d} \cdot \text{kg}^{-1}$  pour le Zn vraiment dissout, ces valeurs étant respectivement 27 et 88 fois plus faibles que le FC terrestre pour le Zn dans IMPACT 2002 ( $128 \text{ PAF} \cdot \text{m}^3 \cdot \text{d} \cdot \text{kg}^{-1}$ ) et utilisé actuellement. Les conclusions de ce manuscrit sont que l’inclusion de la spéciation du Zn permet d’obtenir des FC inférieurs d’environ 2 ordres de grandeur aux FC actuellement utilisés.



### 3. Déterminer l'importance d'inclure la spéciation du Zn en écotoxicité terrestre en ACV

Le troisième objectif était de déterminer l'importance d'intégrer la spéciation du Zn dans la définition des FC pour l'écotoxicité terrestre par la réalisation d'une étude de cas où le Zn est un des principaux contributeurs pour les impacts écotoxicologiques terrestres. Ceci a mené à la rédaction du troisième manuscrit intitulé "*Case study : Does taking zinc speciation into account in terrestrial ecotoxicity make a difference for LCA results?*" et soumis à la revue *The Journal of Cleaner Production* (chapitre 5). Une étude de cas portant sur la donnéeecoinvent "market for electricity, low voltage CA-QC" a été réalisée avec la méthodologie IMPACT 2002+. Plusieurs scénarios ont été testés, notamment, l'utilisation du FC pour l'écotoxicité terrestre actuel du modèle IMPACT 2002 et un FC pour l'écotoxicité terrestre dérivé à partir du modèle USEtox, pour représenter les scénarios qui ne prennent pas en compte la spéciation. Pour les scénarios qui considèrent la spéciation, les valeurs génériques de FC basées sur le Zn soluble et le Zn vraiment dissout, ainsi que les valeurs minimales et maximales des FC régionalisés ont été testées. L'importance de considérer la spéciation a été déterminée en comparant, pour les différents scénarios, 1) la contribution du Zn émis dans le sol à l'impact écotoxicologique terrestre (PDF.m<sup>2</sup>.yr) (PDF : potentially disappeared fraction of species) ainsi qu'à l'impact sur la qualité des écosystèmes (PDF.m<sup>2</sup>.yr), 2) le rang du Zn parmi les substances qui contribuent le plus à l'impact écotoxicologique terrestre et 3) les scores d'impact totaux pour l'écotoxicité terrestre et pour la qualité des écosystèmes.

Les résultats, présentés au chapitre 5, indiquent qu'en incluant la spéciation du Zn, la contribution du Zn émis dans le sol à la catégorie d'impact "écotoxicité terrestre" diminue de 26% à au plus 1,27%, les scores d'impacts étant réduits de 1,44 à 14,37 ordres de grandeur; le Zn passe du 2<sup>e</sup> rang à un rang situé entre la 9<sup>e</sup> et a 255<sup>e</sup> position parmi les principaux contributeurs à l'écotoxicité terrestre; et les scores totaux pour l'écotoxicité terrestre et pour la qualité des écosystèmes sont réduits de 25-26% et 21-22% respectivement. Ces résultats illustrent l'importance de considérer la spéciation du Zn dans les sols pour cette étude de cas et l'influence considérable que cette inclusion pourrait avoir sur les impacts écotoxicologiques et les résultats des ACV.

De manière générale, cette thèse a permis non seulement d'obtenir des FC régionalisés incluant la spéciation du Zn pour l'écotoxicité terrestre qui sont directement applicables dans les

méthodes ACV actuelles, mais elle a permis également de montrer qu'il est possible d'utiliser les modèles géochimiques de spéciation à grande échelle pour les sols. Elle propose une méthode qui serait facilement généralisable aux autres métaux et a également montré à quel point l'inclusion de la spéciation dans les FC des métaux en ACV pour l'écotoxicité terrestre peut avoir une influence considérable sur les scores d'impacts des ACV. Ces résultats permettront d'améliorer grandement la crédibilité de l'ACV, ce qui aura une portée majeure dans le domaine de l'environnement, l'ACV étant une mesure de plus en plus préconisée dans les directives environnementales et dans les entreprises à l'échelle internationale.

## ABSTRACT

Life cycle assessment (LCA) is a global comparative decision making tool aiming to determine environmental impacts of a product, service or process. In this method, impact scores obtained for each impact category considered (e.g. climate change, land use, human toxicity, ecotoxicity) by multiplying the total mass of a substance by a corresponding characterization factor (CF) are compared. These CFs are specific to each substance and each impact category and are determined with the use of models. For the ecotoxicity impact category, these models consider the fate of the emitted substance in the various environmental compartments and the ecotoxic effect of this substance occurring on ecological receptors. Life cycle impact assessment of metals is a major issue in LCA, mainly because models were developed initially for organic compounds and are applied without distinction to metals even if their properties differ greatly. In fact, unlike organic compounds, metals can part into various species according to the physicochemical conditions of the environment. This speciation determines the bioavailable fraction that is likely to cause an ecotoxicological effect. Yet, this speciation is not taken into account in LCA models and this causes a domination of impacts related to metals in ecotoxicity not necessarily due to a high toxicity. In response to this, LCA analysts tend to dismiss metal emissions or ecotoxicological impacts of their results, creating a major credibility issue.

In the last decade, the LCA limits regarding the consideration of metals have been recognized by two workgroups of the life cycle initiative of the United Nations environmental program (UNEP) and the Society of Environmental Toxicology and Chemistry (SETAC). These groups have suggested a framework for including metal speciation in the definition of CFs for freshwater by including a bioavailability factor (BF) that represents the bioavailable fraction obtained with the use of a geochemical speciation model and by taking the spatial variability of the physicochemical parameters influencing speciation with the creation of freshwater archetypes of same properties. Following these recommendations, CFs for freshwater ecotoxicity have been obtained for 14 cationic metals with the use of 7 freshwater archetypes.

The use of geochemical speciation models are not necessarily applicable to soils: models being initially developed for aquatic environments, the assumptions are not necessarily applicable to heterogeneous environments like soils. Also, the complexity of soils and the correlation of physicochemical parameters influencing speciation could complexify the use of archetypes. For

this reason, another method, which is the use of empirical regressions to determine BF<sub>s</sub>, has been suggested for soils to include speciation of nickel (Ni) and copper (Cu) in the CF definition. Yet, empirical regressions are generally applicable only to the soils that have been used to obtain them, and this limits their use in global methods in LCA. Also, the definition of soil archetypes has still not been tested in this context.

The goal of this project is to generate new regionalized CFs for zinc (Zn) that takes into account speciation for terrestrial ecotoxicity. This project aims to reach the following specific goals: 1. Determine the bioavailability of Zn in soils at the global scale using only the soil properties available in world soil database. 2. Calculate regionalized CFs for Zn that show the spatial variability of the bioavailability of Zn and that can readily be used in LCA methodologies. 3. Determine the importance of including Zn speciation in terrestrial ecotoxicity in LCA by carrying out a case study. Zinc has been chosen in this project notably because it is one of the main contributors to the ecological footprint of Canada and the world for terrestrial ecotoxicity and also because of the availability of field data on its speciation in soil.

*1. Determine the bioavailable fraction of Zn at global scale with limited data on soil properties*

The first specific goal of this project aimed at determining the bioavailability of Zn in soils at global scale using only the physicochemical properties of soil available in world soil databases. In LCA, metal emissions can occur everywhere in the world and it is necessary to use a coherent method for the world. This goal has led to the writing of the first manuscript entitled “*Assessing the variability of the bioavailable fraction of zinc at the global scale using geochemical modeling and soil archetypes*” and published by *The International Journal of Life Cycle Assessment* (chapter 3) [1]. The bioavailable fraction of Zn is determined for soils of the world by using the geochemical speciation model WHAM 6.0 (Windermere humic aqueous model) and the Harmonized world soil database (HWSD). The first step was to validate with field data the applicability of the WHAM 6.0 model for soils when using as input data only the following soil parameters available at global scale: soil pH, cationic exchange capacity (CEC), organic matter (OM) and carbonate contents, and soil texture. This method has been compared with the use of empirical regressions.

Results related to this goal, presented in chapter 3, indicate that it is possible to predict the bioavailable fraction of Zn with an uncertainty lower than 2 orders of magnitude for a majority of soils as compared to field data, 41% of the predictions being in the same order of magnitude as the field data. Estimates obtained with WHAM 6.0 model were closer to field data in terms of value and rank compared to estimates obtained with empirical regressions. Bioavailable factors obtained for soils of the world vary over 6 orders of magnitude when soluble Zn is considered to be the bioavailable fraction and over 18 orders of magnitude when using true solution Zn (free ions and ion pairs) as the bioavailable fraction. Soils of the world were grouped in 231 archetypes defined according to key properties influencing speciation that are available at global scale (texture, pH, CEC, OM and carbonate contents) in order to evaluate the extent of the validation process. Field data used in the validation process covers 29 archetypes and represent 25% of the HWSD soil units. It has been possible to conclude that the use of WHAM 6.0 model seems to give more representative estimates of the bioavailable fraction of Zn than empirical regressions, that soluble Zn calculated with WHAM 6.0 model is a more reliable indicator for the bioavailable fraction than true solution Zn and that, considering the extent of the validation process, this method seems promising to study the bioavailability of Zn in soils at global scale.

## 2. Calculate regionalized CFs for Zn that take speciation into account

Following this step, BF<sub>s</sub> were integrated in the determination of CF<sub>s</sub> for Zn for terrestrial ecotoxicity and the regionalization level required to adequately represent the spatial variability of CF<sub>s</sub> has been defined. This led to the writing of the second manuscript entitled “*Characterization factors for zinc terrestrial ecotoxicity including speciation*” submitted to *The International Journal of Life Cycle Assessment* (chapter 4). First of all, fate factors (FF) were determined using the USEtox model and specific partition coefficients ( $K_d$ ) obtained with WHAM 6.0 model. Then effect factors (EF) were calculated using the AMI method (Assessment of mean impact) with terrestrial ecotoxicological data ( $EC_{50}$ ) available in ecotoxicological databases. To do so, various scenarios have been tested in order to be as coherent as possible with BF<sub>s</sub> despite the lack of precision of ecotoxicological data, especially regarding the soils used for the ecotoxicological tests. The definition of soil archetypes established in the previous step has been refined in order to better represent the CF spatial variability and to obtain a spatial resolution more manageable for LCA. In order to consider also the cases in which the emission sites are not known, like it happens frequently in LCA, generic CF values were obtained using the population density as an

emission proxy for Zn. Results are then presented in a map of the world in order to facilitate their use.

Results, presented in chapter 4, indicate that a generic CF value could be sufficient to represent soils of the world when BF is defined using soluble Zn, CF values being concentrated in a 1.76 order of magnitude interval. This is not the case when true solution Zn is used, CF values varying over 14 orders of magnitude (5.45 orders of magnitude for a 95% confidence interval) for soils of the world. In order to represent this spatial variability, soils were grouped into 518 archetypes, the condition to define an archetype being to preserve variability inferior to two orders of magnitude for CF values in each archetype. This condition is respected for 83% of archetypes (85% with a 95% confidence interval). To facilitate the use of archetypes, 13 groupes of archetypes have been created according to the median CF values for each archetype. The generic CF values calculated with the emission proxy are  $4.7 \text{ PAF} \cdot \text{m}^3 \cdot \text{d} \cdot \text{kg}^{-1}$  (PAF: potentially affected fraction of species) for soluble Zn and  $1.45 \text{ PAF} \cdot \text{m}^3 \cdot \text{d} \cdot \text{kg}^{-1}$  for true solution Zn, these values being respectively 27 and 88 times lower than terrestrial CF for Zn in the current IMPACT 2002 model ( $128 \text{ PAF} \cdot \text{m}^3 \cdot \text{d} \cdot \text{kg}^{-1}$ ). This manuscript has shown that including Zn speciation allows obtaining CF values that are around 2 orders of magnitude lower than current CFs.

### 3. *Determine the importance of including Zn speciation in terrestrial ecotoxicity in LCA*

The third specific goal of this project was to determine the importance of integrating Zn speciation in the CF definition for terrestrial ecotoxicity by carrying out a case study where Zn is one of the major contributors to the terrestrial ecotoxicological impacts. This led to the writing of the third manuscript entitled “Case study: *Does taking zinc speciation into account in terrestrial ecotoxicity make a difference for LCA results?*” and submitted to *The Journal of Cleaner Production* (chapter 5). A case study on theecoinvent “market for electricity, low voltage CA-QC” data has been carried out using the IMPACT 2002+ methodology. Different CFs for Zn were tested in this study (IMPACT 2002 CF and USEtox derived terrestrial CF without speciation; generic default CF values for the world including speciation based on either soluble or true solution Zn as well as minimum and maximum regionalized CF values including speciation). The importance of including speciation has been determined by comparing, for the different options, 1) the contribution of Zn emitted to soil to terrestrial ecotoxicity impact category and to ecosystem quality damage category impact scores ( $\text{PDF} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{yr}$ ) (PDF: potentially disappeared

fraction of species), 2) the rank of Zn emitted to soil as a contributor to terrestrial ecotoxicity impact category and 3) the total terrestrial ecotoxicity and total ecosystem quality impact scores.

Results, presented in chapter 5, indicate that when including Zn speciation, the contribution of Zn emitted to soil to the terrestrial ecotoxicity impact category is decreases from 26% to a maximum of 1.27%, the impact scores being reduced from 1.44 to 14.37 orders of magnitude; Zn position falls from the 2<sup>nd</sup> place to a rank between the 9<sup>th</sup> and 255<sup>th</sup> position among the major contributors to terrestrial ecotoxicity. Total terrestrial ecotoxicity and total ecosystem quality impact scores are respectively 25-26% and 21-22% lower. These results show the importance of considering Zn speciation in soil for this case study and the considerable importance this inclusion could have on the ecotoxicological impacts and LCA results.

In general, this thesis has allowed not only obtaining regionalized CF including Zn speciation for terrestrial ecotoxicity that are directly applicable in current LCA methodologies, but it has shown that it is possible to use geochemical speciation models for soils at global scale. This thesis suggests a method that is easily generalizable to other metals and has also shown that including speciation in CFs for metals in terrestrial ecotoxicity could have a considerable influence on impact scores in LCA. These results will allow improving greatly the credibility of LCA, and this could have a considerable impact in the environmental field, as LCA taking more and more a great place in environmental directives and in enterprises worldwide.

## TABLE DES MATIÈRES

DÉDICACE.....	III
REMERCIEMENTS .....	IV
RÉSUMÉ.....	V
ABSTRACT .....	XI
TABLE DES MATIÈRES .....	XVI
LISTE DES TABLEAUX.....	XXII
LISTE DES FIGURES .....	XXIV
LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS .....	XXVI
LISTE DES ANNEXES .....	XXIX
INTRODUCTION.....	1
CHAPITRE 1    REVUE CRITIQUE.....	4
1.1    Entre émission et impact .....	4
1.2    L'analyse du cycle de vie (ACV).....	4
1.2.1    Description générale de la méthode .....	4
1.2.2    Forces et faibles de l'ACV .....	5
1.2.3    Évaluation des impacts du cycle de vie.....	5
1.2.4    Impacts écotoxicologiques en ACV .....	6
1.2.5    Les méthodes de caractérisation en ACV et l'impact écotoxicologique des métaux...	7
1.2.6    Introduction aux problèmes de l'ACV concernant les métaux .....	10
1.3    Les particularités des métaux .....	11
1.3.1    Spéciation des métaux.....	12
1.3.2    Biodisponibilité des métaux .....	14
1.3.3    Distribution des métaux dans les sols et coefficients de partition.....	14



1.3.4	Essentialité des métaux .....	15
1.3.5	Le cas du Zn : exemple d'un élément trace essentiel .....	15
1.4	Controverses et limites de l'ACV : intégration des particularités des métaux.....	19
1.4.1	Concentration totale et spéciation .....	19
1.4.2	Biodisponibilité et controverses .....	21
1.4.3	Effets écotoxiques des métaux .....	23
1.4.4	Concentrations naturelles .....	24
1.4.5	Essentialité des métaux .....	25
1.4.6	Séquestration définitive des métaux.....	25
1.4.7	Complexité des métaux .....	26
1.4.8	Groupes de travail sur les métaux .....	27
1.5	Intégrer la spéciation des métaux en ACV : percées en écotoxicité aquatique et terrestre	28
1.5.1	Utiliser un modèle géochimique de spéciation pour intégrer la spéciation pour 14 métaux cationiques en écotoxicité aquatique .....	28
1.5.2	Utiliser des régressions empiriques et un modèle de type ligand biotique pour intégrer la spéciation du Cu et du Ni dans le calcul des FC en écotoxicité terrestre .....	32
CHAPITRE 2 PROBLÉMATIQUE, HYPOTHÈSE DE RECHERCHE, OBJECTIFS ET MÉTHODOLOGIE .....		35
2.1	Problématique.....	35
2.2	Hypothèse de recherche .....	36
2.3	Objectifs .....	37
2.3.1	Objectif général .....	37
2.3.2	Objectifs spécifiques .....	37
2.4	Choix du métal : le Zn.....	37

2.5	Méthodologie générale.....	38
CHAPITRE 3 PREMIER MANUSCRIT: ASSESSING THE VARIABILITY OF THE BIOAVAILABLE FRACTION OF ZINC AT THE GLOBAL SCALE USING GEOCHEMICAL MODELING AND SOIL ARCHETYPES [1].....		
3.1	Présentation du premier manuscrit.....	41
3.2	Abstract .....	41
3.2.1	Purpose .....	41
3.2.2	Methods.....	41
3.2.3	Results and discussion.....	42
3.2.4	Conclusions .....	42
3.2.5	Keywords .....	42
3.3	Introduction .....	42
3.4	Methods.....	47
3.4.1	Nomenclature .....	47
3.4.2	Use of WHAM 6.0 to obtain Zn bioavailable fraction in soils .....	48
3.4.3	BF calculation with empirical regressions and comparisons .....	51
3.4.4	Defining Zn bioavailable fraction for all soil types .....	52
3.5	Results .....	54
3.5.1	Zn speciation in soils- field data BF <sub>exp</sub> ).....	54
3.5.2	BF <sub>WHAM</sub> calculation with WHAM 6.0 .....	55
3.6	Discussion .....	56
3.6.1	BF <sub>WHAM</sub> calculation with WHAM 6.0 .....	56
3.6.2	Empirical BF <sub>s</sub> .....	58
3.6.3	Zn bioavailable fraction for worldwide soil type .....	59
3.7	Conclusion.....	62

CHAPITRE 4	DEUXIÈME MANUSCRIT: CHARACTERIZATION FACTORS FOR ZINC TERRESTRIAL ECOTOXICITY INCLUDING SPECIATION.....	64
4.1	Lien entre le premier et le deuxième manuscrit .....	64
4.2	Présentation du deuxième manuscrit.....	64
4.3	Abstract .....	65
4.3.1	Purpose .....	65
4.3.2	Materials and methods .....	65
4.3.3	Results and discussion.....	65
4.3.4	Conclusions .....	65
4.3.5	Keywords .....	66
4.4	Introduction .....	66
4.5	Methods.....	69
4.5.1	Nomenclature .....	69
4.5.2	General considerations .....	70
4.5.3	Fate factor determination .....	70
4.5.4	Bioavailability factor definition .....	71
4.5.5	Effect factor calculation .....	71
4.5.6	CF calculation .....	73
4.5.7	Spatial resolution.....	74
4.6	Results and discussion.....	75
4.6.1	Fate factors .....	75
4.6.2	Bioavailability factors .....	76
4.6.3	Effect factors .....	76
4.6.4	Characterization factors.....	79
4.6.5	Spatial resolution – archetype definition.....	80

4.6.6	CFs map and final results .....	82
4.7	Conclusion.....	85
CHAPITRE 5 TROISIÈME MANUSCRIT: CASE STUDY: DOES TAKING ZINC SPECIATION INTO ACCOUNT IN TERRESTRIAL ECOTOXICITY MAKE A DIFFERENCE FOR LIFE CYCLE ASSESSMENT RESULTS?.....		
		87
5.1	Lien entre le deuxième et le troisième manuscrit.....	87
5.2	Présentation du troisième manuscrit .....	87
5.3	Abstract .....	88
5.4	Highlights .....	88
5.5	Keywords .....	89
5.6	Introduction .....	89
5.7	Methods.....	92
5.7.1	Case study .....	92
5.7.2	CF tested scenarios.....	94
5.7.3	Scenario comparisons.....	95
5.8	Results and discussion.....	96
5.8.1	Contribution of the Zn emitted to soil impact score to the terrestrial ecotoxicity impact score (PDF.m <sup>2</sup> .yr).....	96
5.8.2	Contribution of the terrestrial ecotoxicity impact from Zn emitted in soil to ecosystem quality damage (PDF.m <sup>2</sup> .yr).....	98
5.8.3	Rank of Zn among the substance that contribute the most to terrestrial ecotoxicity .	99
5.8.4	Recommendations for LCA users .....	100
5.9	Conclusion.....	101
CHAPITRE 6 DISCUSSION GENERALE: PRISE EN COMPTE DES METAUX EN ACV ET OPERATIONALISATION DES FC REGIONALISES .....		
		102

6.1	Prise en compte des métaux en ACV : avancées réalisées et limites de la méthode ...	102
6.2	Recommandations pour l'opérationnalisation des FC .....	108
6.3	Recommandations pour étendre la méthode aux autres métaux .....	109
CONCLUSION .....		112
6.4	Contributions scientifiques.....	112
6.5	Contributions pratiques .....	113
BIBLIOGRAPHIE .....		115
ANNEXES .....		130

## LISTE DES TABLEAUX

Tableau 1.1	Métaux pour lesquels des FC sont disponibles dans les différentes approches ACV.....	9
Tableau 1.2	Spéciation du Zn dans les sols en fonction du pH.....	17
Tableau 4.1	EC <sub>50</sub> values and soil characteristics included in the various assumptions tested to determine HC50 <sub>EC50</sub> .....	72
Tableau 4.2	Fate factors obtained for the 5213 HWSO soil samples as compared to USEtox™ default FFs[days] [42] .....	75
Tableau 4.3	EFs calculated for each option selected .....	76
Tableau 5.1	CF values that were tested for the different scenarios .....	95
Tableau 5.2	The contribution of the total terrestrial ecotoxicity score (PDF.m <sup>2</sup> .yr) to the total ecosystem quality damage score (PDF.m <sup>2</sup> .yr) is presented for the different scenarios .....	98
Tableau 5.3	The rank of Zn emitted to soil that contribute to the terrestrial ecotoxicity impact score.....	100
Tableau A.1	Range of soil properties listed in validation samples for labile Zn .....	132
Tableau A.2	Range of soil properties listed in validation samples for soluble Zn .....	132
Tableau A.3	Range of soil properties for the 78 samples selected for WHAM modeling for soluble Zn.....	132
Tableau A.4	Assumptions for WHAM 6.0 parameterization with experimental soil data.....	133
Tableau A.5	Data for CEC conversion .....	135
Tableau A.6	Available water capacity according to soil texture [183].....	136
Tableau A.7	Results for multiple linear regressions for soluble Zn .....	141
Tableau A.8	Results for multiple linear regressions for labile Zn .....	142
Tableau A.9	Criteria for the creation of subgroups at the basis of archetype definition .....	143
Tableau A.10	Archetypes created with experimental soil data.....	144

Tableau A.11	Range of soil properties listed in HWSD .....	147
Tableau A.12	Assumptions for WHAM 6.0 speciation modeling for HWSD soil data .....	147
Tableau A.13	HWSD soil archetypes with final validation verdict.....	149
Tableau A.14	Soil taxonomy groups comprised in each archetype .....	167
Tableau B.15	Ecotoxicological data used to derive EFs .....	183
Tableau B.16	Soil archetypes used in Plouffe <i>et al.</i> (2015) .....	222
Tableau B.17	Description of subcategories used to define the 518 archetypes .....	234
Tableau B.18	518 soil archetypes .....	234
Tableau B.19	CF results (log CF) for soluble Zn for the 518 archetypes .....	260
Tableau B.20	CF results (log CF) for true solution Zn for the 518 archetypes .....	277
Tableau B.21	CF results (log CF) for true solution Zn for the 13 groups.....	300
Tableau B.22	CF results (log CF) for true solution Zn for the 13 groups with a 95% confidence interval.....	300
Tableau C.23	Ranking and contribution (PDF.m <sup>2</sup> .yr) of the 263 substances that contribute the most to terrestrial ecotoxicity impact score for the IMPACT_2002 and USEtox_mod scenarios .....	301
Tableau C.24	Ranking and contribution (PDF.m <sup>2</sup> .yr) of the 263 substances that contribute the most to terrestrial ecotoxicity impact score for the generic_Sol and generic_TS scenarios. ....	308
Tableau C.25	Ranking and contribution (PDF.m <sup>2</sup> .yr) of the 263 substances that contribute the most to terrestrial ecotoxicity impact score for the TS_min and TS_max scenarios .....	315
Tableau C.26	Ranking and contribution (PDF.m <sup>2</sup> .yr) of the 263 substances that contribute the most to terrestrial ecotoxicity impact score for the QC_TS_min and QC_TS_max scenarios .....	323

## LISTE DES FIGURES

Figure 2.1	Méthodologie générale pour ce projet.....	40
Figure 3.1	Description of zinc fractions used in this study .....	47
Figure 3.2	$BF_{exp}$ and spread of $\log BF_{exp}$ for labile (1a and 1b) and soluble (1c and 1d) Zn.....	55
Figure 3.3	Comparison of $BF_{WHAM}$ and $BF_{exp}$ for soluble and labile Zn .....	56
Figure 3.4	Comparison between $BF_{reg}$ and $BF_{exp}$ for soluble Zn .....	58
Figure 3.5	HWSD $BF_{WHAM}$ and spread of $\log(BF_{WHAM})$ for soluble (5a and 5b) and true solution Zn (5c and 5d) .....	60
Figure 3.6	Extent of WHAM 6.0 validation for HWSD soil archetypes .....	61
Figure 3.7	Mean $BF_{WHAM}$ for HWSD soil data for true solution (6a) and soluble (6b) Zn .....	62
Figure 4.1	Effect factors calculated for options 2-5, separating $EC_{50}$ according to speciation (total, soluble, labile and free ion Zn) .....	77
Figure 4.2	Effect factors calculated for option 6 (subdivision according to pH) and 7 (subdivision according to OM content) .....	78
Figure 4.3	New CFs as compared to USEtox derived terrestrial CF and IMPACT 2002 soil CF for soluble and true solution Zn for a CNS-CNS emission-reception pattern .....	79
Figure 4.4	Definition of the 13 groups of archetypes .....	82
Figure 4.5	Maps of the world indicating the 13 groups of soil according to CF values when considering all soil samples (A) and when considering a 95% confidence interval (B).....	84
Figure 5.1	Levels of the cause and effect chain that are considered and impact and damage scores that are compared in the study.....	95
Figure 5.2	The Zn emitted to soil impact score ( $PDF.m^2.yr$ ) (no.2) is compared to the terrestrial ecotoxicity impact score (in $PDF.m^2.yr$ and in %) (no.1) .....	97
Figure 5.3	The Zn emitted to soil terrestrial ecotoxicity impact score ( $PDF.m^2.yr$ ) (no.2) is compared to the ecosystem quality damage score (in $PDF.m^2.yr$ and in %) (no. 3).....	99



Figure A.4	Comparison between $C_{\text{soluble}}$ (experimental data) and $C_{\text{sol Groen}}$ (obtained using equation 6) .....	138
Figure A.5	Comparison between $C_{\text{soluble}}$ (experimental data) and $C_{\text{sol Groen}}$ (obtained using equation 7) .....	139
Figure A.6	Comparison of $BF_{\text{exp}}$ and $BF_{\text{WHAM}}$ with and without the inclusion of DOC for soluble Zn soil samples .....	140
Figure A.7	Comparison between $BF_{\text{exp}}$ and $BF_{\text{WHAM}}$ with and without the inclusion of DOC for Labile Zn .....	141
Figure A.8	Spread in orders of magnitude of $BF_{\text{WHAM}}$ and $BF_{\text{reg}}$ as compared to $BF_{\text{exp}}$ for soluble and labile Zn .....	149
Figure B.9	Spread of CF values for the 231 archetypes resolution .....	234
Figure B.10	Spread of CF values for the 518 soil archetypes resolution .....	259
Figure B.11	Spread of CF values for the 518 soil archetypes resolution with a 95% confidence interval .....	259

## LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS

ACV	Analyse du cycle de vie
ACVI	Évaluation des impacts environnementaux du cycle de vie
Ag	Argent
Al	Aluminium
AMI	Assessment of mean impact
As	Arsenic
Ba	Baryum
Be	Béryllium
BF	Bioavailability factor
BLM	Biotic ligand model
Cd	Cadmium
CEC	Capacité d'échange cationique/cation exchange capacity
CF	Characterization factor
Co	Cobalt
Cr	Chrome
Cs	Césium
Cu	Cuivre/copper
EC <sub>50</sub>	Effect concentration for 50% of the population
EF	Effect factor
FB	Facteur de biodisponibilité
FC	Facteur de caractérisation
FD	Facteur de devenir
FE	Facteur d'effet

Fe	Fer
FF	Fate factor
FIAM	Free ion activity model
HC50 <sub>EC50</sub>	Hazard concentration: moyenne géométrique calculée à partir des EC <sub>50</sub>
Hg	Mercure
HWSD	Harmonized World Soil Database
K <sub>d</sub>	Coefficient de partition solide-solution
LCA	Life cycle assessment
MO	Matière organique
Mn	Manganèse
Ni	Nickel
OM	Organic matter
PAF	Potentially affected fraction of species
Pb	Plomb
PDF	Potentially disappeared fraction of species
PNUE	Programme des Nations-Unies pour l'Environnement
Sb	Antimoine
SETAC	Society of Environmental Toxicology and Chemistry
Sn	Étain
Sr	Strontium
TBLM	Terrestrial biotic ligand model
Ti	Titane
Tl	Thallium
UNEP	United Nations Environmental Program

V	Vanadium
W	Tungstène
WHAM	Windermere Humic Aqueous Model
Zn	Zinc

## **LISTE DES ANNEXES**

Annexe A – supporting information pour le premier manuscrit .....	130
Annexe B – supporting information pour le deuxième manuscrit .....	183
Annexe C – supporting information pour le troisième manuscrit .....	301

## INTRODUCTION

Présents à l'état naturel dans l'environnement, les métaux sont également émis suite à de nombreuses activités anthropiques et peuvent contaminer les compartiments environnementaux, notamment les sols [2, 3]. Étant donné leur persistance dans l'environnement, les métaux s'accumulent et les émissions anthropiques dans les sols s'ajoutent aux teneurs naturelles [4, 5]. Certains métaux sont essentiels à la vie des organismes vivants à faibles concentrations, mais à partir d'un seuil propre à chaque métal, ils sont tous toxiques [2, 6]. Certaines formes métalliques ne sont pas accessibles aux organismes vivants alors que d'autres sont susceptibles d'être absorbées et de générer des effets néfastes pour les organismes, d'où la nécessité de quantifier les impacts de ces espèces métalliques [7].

Certaines méthodes tentent d'évaluer ces impacts, mais les résultats ne représentent pas toujours la réalité. Notamment, en analyse du cycle de vie (ACV), les impacts écotoxicologiques des métaux dominent souvent les résultats, surtout lorsque la quantité totale des métaux est considérée comme étant la fraction qui engendre des effets écotoxiques [8, 9]. Ceci pose un problème de crédibilité majeur pour les ACV, surtout pour les grands émetteurs de métaux, puisque en réponse à cette domination, plusieurs analystes décident d'écarter les impacts écotoxicologiques des métaux de leurs analyses [9]. Or, la domination des impacts liés aux métaux ne reflète pas nécessairement une écotoxicité réelle, mais plutôt l'utilisation de modèles inappropriés : ces derniers ont été développés pour des composés organiques dont les propriétés diffèrent trop de celles des métaux pour permettre une telle généralisation [5, 10, 11]. En effet, les métaux ne sont pas biodégradables, peuvent être essentiels à la vie et surtout, se répartissent sous plusieurs espèces selon les caractéristiques physicochimiques du milieu où ils se trouvent [6]. Ceci est d'autant plus important pour des médias très hétérogènes, comme les sols [10]. Cette spéciation des métaux gouverne leur biodisponibilité et leur écotoxicité et devrait être considérée pour améliorer la modélisation et l'évaluation des impacts des métaux.

Cependant, intégrer la spéciation des métaux dans une méthode globale comme l'ACV ne se fait pas sans difficulté, étant donné le peu d'informations précises concernant les émissions en ACV (lieu d'émission, type de sols) et le lien étroit existant entre la spéciation et des propriétés environnementales possédant une grande variabilité géographique.

Durant la dernière décennie, deux groupes de travail de l'initiative sur le cycle de vie du Programme des Nations Unies pour l'environnement (PNUE) et de la *Society of environmental toxicology and chemistry* (SETAC) ont relevé les lacunes concernant le traitement des métaux en ACV et proposé des stratégies pour prendre en compte leurs particularités [12, 13]. Suite à ces groupes de travail, des avancées considérables ont été effectuées pour intégrer la spéciation de 14 métaux en ACV en écotoxicité aquatique d'eau douce [14-18], mais l'intégration de la spéciation en écotoxicité terrestre en est encore à ses balbutiements [19].

Deux approches sont préconisées pour intégrer la spéciation des métaux dans des méthodes globales comme l'ACV. D'une part, les travaux en écotoxicité aquatique ainsi que le Consensus de Clearwater suggèrent l'utilisation d'un modèle géochimique de spéciation, notamment le modèle WHAM 6.0 (Windermere Humic Aqueous Model) pour obtenir la fraction biodisponible et l'utilisation d'archétypes de mêmes propriétés pour considérer la variabilité spatiale des propriétés environnementales [13-17]. Cette approche, quoiqu'intéressante, peut être difficile à appliquer pour les sols, les modèles étant développés pour le milieu aquatique et requérant des données précises sur les conditions environnementales, données qui ne sont pas disponibles à grande échelle pour les sols. Owsianiak *et al.*, quant à eux, ont opté pour l'emploi de régressions empiriques pour obtenir les fractions biodisponibles [19]. Cependant, l'utilisation de ce type de régressions peut être difficilement applicable à l'extérieur du champ d'étude initial [20, 21].

L'objectif général de ce projet est de générer des nouveaux facteurs de caractérisation (FC) régionalisés pour le zinc (Zn) qui tiennent compte de la spéciation pour l'écotoxicité terrestre.

La méthodologie proposée dans ce projet est la suivante. L'utilisation d'un modèle géochimique de spéciation (le modèle WHAM 6.0) pour obtenir la fraction biodisponible du Zn dans les sols en utilisant uniquement les propriétés de sols disponibles à l'échelle mondiale a été validée par une comparaison avec des données de terrain. L'approche a également été comparée à l'utilisation de régressions empiriques. Ensuite, des FC sont obtenus pour le Zn pour les sols du monde. Une approche par archétypes de sols a permis de mieux représenter leur variabilité spatiale. Différents niveaux de précision ont été élaborés pour tenir compte de la disponibilité des données de sol et de la précision requise. Une étude de cas dans laquelle le Zn occupe une grande

part de l'impact écotoxicologique a été effectuée afin d'évaluer l'importance de considérer la spéciation du Zn en écotoxicité terrestre en ACV.

Le premier chapitre de cette thèse contient une revue de littérature critique menant à l'hypothèse de recherche, aux objectifs et à la méthodologie présentés dans le chapitre 2. Les chapitres 3, 4 et 5 présentent les trois manuscrits découlant de ce projet : le premier portant sur l'utilisation d'un modèle géochimique pour obtenir la fraction biodisponible de Zn pour l'ensemble des sols du monde; le deuxième, sur l'obtention des FC régionalisés pour l'écotoxicité terrestre pour Zn; et le troisième, présentant les résultats d'une étude de cas qui permet d'illustrer l'importance d'inclure la spéciation en ACV. Finalement, le chapitre 6 de cette thèse présente une discussion générale, les contributions de ce projet et les perspectives de recherches qui en découlent.



## **CHAPITRE 1 REVUE CRITIQUE**

### **1.1 Entre émission et impact**

Une substance chimique émise dans l'environnement est susceptible de migrer dans divers compartiments environnementaux (eau, sol, air, sédiments), de se transformer par diverses réactions chimiques ou biologiques, de se fixer sur des particules solides, d'être dégradée ou séquestrée dans des minéraux [22-24]. Tous ces processus constituent le devenir environnemental de la substance [24]. Une fraction ou la totalité de la substance peut ensuite entrer en contact avec des organismes vivants, que ce soit par inhalation, ingestion ou par contact cutané, ou par une combinaison de ces voies d'exposition comme c'est le cas lors d'une immersion dans un milieu contaminé (ex. les poissons dans une eau polluée) [24, 25]. Cette exposition risque de provoquer des effets écotoxiques sur ces êtres vivants et générer un impact sur les écosystèmes [22, 24, 25]. Ces impacts écotoxicologiques peuvent être évalués par diverses méthodes dont l'ACV.

### **1.2 L'analyse du cycle de vie (ACV)**

#### **1.2.1 Description générale de la méthode**

L'ACV est une approche systématique relativement nouvelle visant à évaluer les impacts environnementaux d'un produit, d'un service ou d'un procédé pour l'ensemble de son cycle de vie et ce, pour une fonction particulière [26].

Le cycle de vie d'un produit comprend généralement les étapes suivantes: l'extraction des matières premières et le raffinage, l'acquisition d'énergie, la fabrication du produit, l'utilisation et la réutilisation du produit, le recyclage et l'élimination finale [25, 27]. Toutes ces étapes génèrent des déchets et des émissions et entraînent la consommation de ressources et d'énergie [25]. Ces échanges environnementaux contribuent à plusieurs catégories d'impacts, notamment les changements climatiques, l'appauvrissement en ozone stratosphérique, la formation de photooxydants (smog), l'eutrophisation, l'acidification, les stress toxicologiques sur les écosystèmes et la santé humaine, l'appauvrissement des ressources et le bruit [25].

L'ACV comporte quatre phases principales décrites dans la norme ISO 14040, à savoir, la définition des objectifs et du champ de l'étude, l'inventaire du cycle de vie, l'évaluation des

impacts environnementaux et l'interprétation [26]. Ainsi, tous les échanges environnementaux pertinents du cycle de vie, c'est-à-dire, les ressources requises, l'énergie consommée et les émissions dans l'environnement engendrées à chaque étape de la vie du produit, service ou procédé sont quantifiées et tabulées dans la phase d'inventaire [25]. Les émissions sont reportées par substance chimique en termes de masse émise à chaque étape du cycle de vie et ce, pour une quantité spécifique de produit [25].

### **1.2.2 Forces et faibles de l'ACV**

L'ACV se distingue de certaines méthodes d'évaluation des impacts comme l'analyse des risques pour l'environnement en ce sens qu'elle évalue des impacts potentiels et ne cherche pas à savoir si une limite réglementaire est dépassée à un lieu ou à un moment donné [25]. C'est un outil d'aide à la décision soutenu par le PNUE et la SETAC [26, 28].

L'ACV permet d'obtenir des informations sur la performance globale et les contributions relatives des différentes étapes du cycle de vie [29]. Une des grandes forces de l'ACV est son approche holistique permettant d'éviter des transferts géographiques de problèmes ou des transferts entre des catégories d'impact [28, 29].

Cependant, l'ACV présente des limites. Puisqu'elle couvre un grand nombre de procédés, il n'est généralement pas possible d'obtenir des données aussi précises pour chaque émission qu'en analyse des risques pour l'environnement [11]. L'utilisation de données génériques en ACV implique qu'elle est incapable de déterminer les impacts qui sont spécifiques à un site [30].

### **1.2.3 Évaluation des impacts du cycle de vie**

La phase d'évaluation des impacts environnementaux du cycle de vie (ACVI) permet de déterminer les impacts environnement potentiels (et non pas réels) engendrés par le produit, le service ou le procédé, pour l'ensemble de son cycle de vie [26, 30]. Elle comporte les étapes suivantes: la définition des catégories d'impact, la classification (association des émissions environnementales aux catégories d'impact), la caractérisation (calcul des impacts potentiels pour les émissions inventoriées), la normalisation et l'interprétation [26, 31]. En ACVI, des modèles permettent de transformer les données d'inventaire en impacts environnementaux [32].

En ACVI, des scores d'impacts sont calculés en multipliant la masse de chaque substance émise dans un compartiment environnemental donné (sol, eau, air) par un facteur de caractérisation (FC) [10, 11, 25]. Ces scores sont ensuite comparés [25]. Les FC représentent la contribution d'une substance chimique émise dans l'environnement à une catégorie d'impact pour un compartiment environnemental donné ou la force relative de la substance par rapport à une substance de référence [11, 25]. Calculés pour chaque catégorie d'impact, ils sont spécifiques à chaque substance et peuvent être fonction du lieu et du moment de l'émission [25]. Pour chaque catégorie d'impact, un modèle de caractérisation basé sur un mécanisme environnemental particulier fait le lien entre les données de l'inventaire et les indicateurs de catégorie, qui sont en fait un point dans la chaîne de cause à effet [26].

### **1.2.4 Impacts écotoxicologiques en ACV**

Les impacts sur les écosystèmes sont déterminés en multipliant la masse de chaque substance émise par un FC issu de la modélisation du devenir environnemental (facteur de devenir) et des effets (facteur d'effet) [10, 25].

Le facteur de devenir (FD) tient compte de la fraction de la substance transférée du compartiment d'émission au compartiment récepteur (ex. de l'air vers les sols) et du temps de résidence dans le compartiment d'émission [10, 25].

Le facteur d'effet (FE) représente le nombre probable d'incidences d'un effet écotoxique sur les organismes vivants par quantité absorbée [25]. La méthode recommandée et utilisée dans les modèles USEtox et IMPACT 2002 pour déterminer les FE d'une substance est la méthode AMI (Assessment of mean impact) qui vise à établir le niveau moyen de toxicité pour la substance en question [10, 33-35]. Le FE y est calculé à partir de la moyenne géométrique des  $EC_{50}$  (concentration induisant un effet chez 50% de la population d'une espèce donnée). Les données pour calculer cette moyenne ( $HC50_{EC50}$ ) doivent couvrir au moins trois phyla d'un écosystème pour considérer la variabilité biologique de l'écosystème [10]. Lorsque les données écotoxicologiques terrestres ne sont pas disponibles, les FE pour le sol sont généralement estimés par extrapolation des FE pour les récepteurs d'écosystèmes aquatiques pour la même substance en utilisant les coefficients de partition eau-sol ( $K_d$ ) [10].

### **1.2.5 Les méthodes de caractérisation en ACV et l'impact écotoxicologique des métaux**

Plusieurs méthodes de caractérisation sont utilisées actuellement en ACV. Certaines méthodes comme EDIP 97, font une évaluation partielle avec les propriétés physicochimiques clés, d'autres, comme USES-LCA et IMPACT 2002+, utilisent des modèles multimédia [33, 36, 37]. Ces modèles sont constitués en général d'équations différentielles du premier degré en régime permanent représentant la distribution des contaminants entre les différents compartiments environnementaux (ex. air, eau, sol, sédiments), la dégradation et les transports par advection [37, 38]. La majeure partie des modèles de devenir ont été développés pour les analyses des risques pour l'environnement et d'abord pour évaluer le devenir des composés organiques non-ioniques. Cependant, certains modèles ont été développés directement pour des méthodes comparatives comme l'ACV (ex. USES-LCA et IMPACT 2002) et certains modèles ont été appliqués aux métaux (ex. EUSES et CALtox) [37].

Certains modèles prennent en compte la variabilité spatiale de certains paramètres environnementaux. Il est reconnu qu'utiliser des FC spécifiques aux régions permet d'améliorer l'évaluation des impacts, principalement ceux régionaux et locaux (Huijbregts et al., 2001; Godin, 2004; Toffoletto et al., 2007). Par exemple, outre sa version a-spatiale où des moyennes pour l'Europe sont utilisées, le modèle IMPACT 2002 possède une version spatiale où l'Europe de l'Ouest est subdivisée en 135 zones pour l'environnement terrestre réparties en fonction des bassins versants et 124 zones océaniques (comprenant chacune 2 compartiments eau et 1 compartiment sédiments) et 157 zones pour l'air divisées selon un maillage de 2 x 2,5 degrés pour l'air et les océans [38, 39]. Chaque bassin versant est considéré comme étant constitué des compartiments suivants : un compartiment sol, un compartiment eau de surface, un compartiment sédiments et un compartiment végétation agricole [38]. Chacune des zones possède ses propres particularités (ex. population et production annuelle de différents aliments) et le modèle considère la dégradation, le transfert intermédia et l'advection et les émissions dans l'eau de surface, l'océan, le sol et l'air [38].

La version a-spatiale du modèle IMPACT 2002, a par la suite été adaptée au contexte géographique canadien en tenant compte des différences entre les caractéristiques du Canada et de l'Europe notamment pour la population et les superficies [40]. La différenciation spatiale dans

la méthode LUCAS (LCIA method Used for a Canadian-Specific context) est basée sur les 15 écozones canadiennes et chaque écozone possède ses propres caractéristiques reliées au climat, au sol, à la faune, à la flore et aux activités humaines [40]. Le développement des FC pour l'écotoxicité dans LUCAS se fait actuellement avec une version du modèle IMPACT 2002 adaptée au contexte canadien, par l'intégration de propriétés chimiques représentatives des conditions moyennes du milieu [40].

Le modèle IMPACT 2002 est également à la base du modèle IMPACT North America qui est un modèle de devenir et d'exposition qui tient compte de la répartition géographique en Amérique du Nord [39]. Le modèle a été testé pour le benzo(a)pyrène, le 2,3,7,8-TCDD et le mercure (Hg). Les concentrations dans les sédiments, l'air, l'eau, le sol, les poissons, la viande et les œufs obtenues par le modèle ont été comparées à des échantillons de terrain. Pour 80% des échantillons, l'écart entre les valeurs modélisées et celles mesurées sur le terrain était de deux ordres de grandeur, l'écart maximal calculé étant de quatre ordres de grandeur, et ce, pour des concentrations qui pouvaient varier de douze ordres de grandeur. Avec l'inclusion des compartiments d'air intérieur et d'air urbain, ce modèle présente des améliorations concernant les transferts de substances dans l'air. Cependant, aucun changement n'est apporté comparativement au modèle IMPACT 2002 concernant le compartiment sol. Il confirme toutefois la nécessité d'utiliser des modèles spatialement différenciés [39].

Depuis 2005, des travaux dirigés par le PNUE et la SETAC ont été entrepris avec les concepteurs des modèles CalTOX, IMPACT 2002, USES-LCA, BETR, EDIP, WATSON et EcoSence. Ces travaux visaient l'identification des principales sources de différences entre les modèles de devenir disponibles et l'obtention d'un consensus scientifique concernant les principaux éléments à intégrer dans la modélisation du devenir des substances dans l'environnement. Quatre modèles, à savoir CalTOX, IMPACT 2002, USES-LCA et EDIP 97 ont été choisis comme référence du futur modèle consensuel étant donné qu'ils fournissent des FC écotoxicologiques pour un grand nombre de substances [36]. Le modèle USEtox est le résultat de ces travaux. Ces travaux ont permis de réduire considérablement les variations dans les résultats de ces quatre modèles (de 13 ordres de grandeurs à un maximum de 2) [33].

Plusieurs paramètres clés ont été identifiés concernant le devenir, principalement pour le compartiment sol. Le modèle USEtox considère deux types de sols : le sol agricole et le sol

naturel. Puisque le sol est un compartiment complexe et hétérogène constitué de plusieurs couches ayant des propriétés de devenir distinctes, le modèle USEtox considère que le compartiment sol est un compartiment d'une couche homogène ayant une profondeur de 10 cm. Le modèle USEtox possède deux échelles spatiales. L'échelle continentale est constituée des six compartiments suivants : air urbain, air rural, sol agricole, sol industriel, eau douce et eau marine côtière. L'échelle globale suit la même structure sans l'air urbain et considère les impacts à l'extérieur de l'échelle continentale. Présentement, le modèle fournit des FC pour les composés organiques non ioniques et non polaires. Les FC pour les métaux, les substances qui se dissocient et les substances amphiphiles ont de très fortes incertitudes et n'ont été calculés qu'à titre intérimaire en attendant que des modèles plus robustes ne soient établis [33, 41, 42].

La caractérisation de l'écotoxicité en ACV n'est pas uniforme. En effet, certains modèles, notamment le modèle USEtox, ne considèrent uniquement l'écotoxicité aquatique d'eau douce [33]. Le modèle IMPACT 2002 intégré dans la méthode IMPACT 2002+ permet d'obtenir des FC pour l'écotoxicité terrestre et aquatique [43, 44]. USES-LCA 2.0 et la méthode ReCiPe, permettent quant à eux de considérer l'écotoxicité aquatique d'eau douce, l'écotoxicité marine et l'écotoxicité terrestre [45].

Actuellement, les méthodes ACV fournissent des FC pour environ une quinzaine de métaux. Cependant, la liste diffère d'une méthode à l'autre, comme indiqué dans le tableau 1.1. Il est donc important de s'assurer que les métaux à l'étude sont effectivement pris en compte lors du choix des méthodes ACV.

Tableau 1.1 Métaux pour lesquels des FC sont disponibles dans les différentes approches ACV

USEtox [41]	IMPACT 2002 [44]	ReCiPe – USES-LCA 2.0 [45]
Ag (II)	Ag	Ag
	Al	
As (III)	As	As
As (V)		
Ba (II)	Ba	Ba
Be (II)		Be
Cd (II)	Cd	Cd
Co (II)	Co	Co
Cr (III)	Cr	Cr
Cr (VI)		Cr (VI)
	Cu	Cu
	Fe	
Hg (II)	Hg	Hg
Mg (VI)		

	Mn	Mn
		Mo
Ni (II)	Ni	Ni
Pb (II)	Pb	Pb
Sb (III)	Sb	Sb
Sb (V)		
Sn (II)		Sn
		Sr
Tl (I)		Ti
V (V)		V
		W
Zn (II)	Zn	Zn

Actuellement, la spéciation et la biodisponibilité des métaux (voir section 1.3) ne sont pas considérées dans la plupart des approches ACV [25]. La méthode ReCiPe tient compte dans la modélisation de l'influence du pH sur le coefficient de partition  $K_d$  de certains métaux telle que déterminée par Sauvé *et al.* [7] [45]. Cependant, le modèle USES-LCA à la base de cette méthode, ne tient pas compte de l'influence de la spéciation sur le devenir et la toxicité [46]. Le modèle consensuel USEtox ne considère pas la spéciation des métaux non plus [33]. La méthode IMPACT 2002+ ne considère pas la spéciation, la biodisponibilité et la bioconcentration des métaux autant pour des émissions à court terme que long terme [44]. Les FC du modèle IMPACT 2002 ne s'appliquent que pour les métaux émis sous la forme d'ion libre et donc les émissions métalliques doivent être spécifiées correctement dans l'inventaire du cycle de vie [44]. Si ce n'est pas le cas, le score final peut être considérablement surestimé [44]. Pourtant, pour des raisons pratiques, les FC sont associés au numéro CAS et aux noms des formes élémentaires de métaux et non pas aux ions [44].

Bien que les paramètres du modèle IMPACT 2002 aient été adaptés au contexte canadien, la méthode LUCAS ne propose pas encore de traitement particulier pour les métaux [40]. Ainsi, les mêmes lacunes concernant ces substances figurent aussi bien dans la méthode LUCAS que dans la méthode IMPACT 2002+.

### 1.2.6 Introduction aux problèmes de l'ACV concernant les métaux

Dans une étude visant à comparer huit différentes méthodes ACV (Stepwise (2006), IMPACT 2002+, EDIP 2003, Eco-Indicateur 99, CML 2001, TRACI 2, ReCiPe, USEtox) concernant les impacts écotoxicologiques des métaux, Pizzol *et al.* (2011) ont soulevé certains

problèmes quant à la capacité des méthodes ACV à prendre en compte l'impact écotoxicologique des métaux [9]. Ils ont reconnu qu'il y a peu d'accord entre les méthodes pour déterminer l'impact écotoxicologique total attribuable aux métaux et pour définir quel métal provoque le plus grand impact écotoxicologique. En effet, l'ordre pour classer les métaux les plus toxiques varie d'une méthode à l'autre. Par exemple, pour un même cas, selon la méthode IMPACT 2002+, les métaux les plus toxiques seraient le Hg, le cuivre (Cu) et Zn, alors qu'en utilisant le modèle USEtox, ce serait l'argent (Ag), le vanadium (V) et le chrome (Cr) (VI). Les auteurs ont toutefois noté que les métaux sont en général les plus grands contributeurs aux impacts écotoxicologiques, leur contribution étant pour la plupart supérieure à 90%. Certains métaux, notamment le cadmium (Cd), le Hg, l'Ag et le Cu font partie des métaux indiqués comme fortement écotoxiques par la plupart des méthodes et représentent à eux seuls environ 25% des impacts écotoxicologiques. Pour d'autres métaux, notamment le béryllium (Be), le Cr(VI), le nickel (Ni) et le Zn, les méthodes fournissent des résultats très contradictoires [9].

Face à cette situation, certains utilisateurs d'ACV décident de retirer certaines substances de l'évaluation des impacts en ACV, ce qui peut influencer les résultats des analyses et soulever un problème de crédibilité des ACV, puisque les ACV seraient réduites à évaluer les économies d'énergie, les impacts sur les changements climatiques et la diminution de l'ozone [9, 36, 47].

Le problème avec les impacts extrêmement élevés des métaux est que ceci ne reflète pas nécessairement une écotoxicité réelle mais plutôt l'utilisation de modèles inappropriés. En effet, les modèles actuellement utilisés en ACV ont été développés pour les composés organiques et sont appliqués sans distinction à toutes les substances [6, 10, 11]. Or, les propriétés des composés organiques diffèrent trop de celles des métaux pour permettre une telle généralisation [5, 10-12].

### **1.3 Les particularités des métaux**

Avant d'aller plus loin dans l'évaluation des limites de l'ACV concernant l'intégration des particularités des métaux, il est nécessaire de présenter ces caractéristiques particulières. Elles sont décrites dans les sous-sections suivantes.



### 1.3.1 Spéciation des métaux

#### 1.3.1.1 Spéciation et distribution des métaux dans les sols

Contrairement aux composés organiques, les métaux ne sont ni créés ni détruits par les processus chimiques et biologiques, ils sont infiniment persistants [4-6]. Cependant, ils peuvent subir plusieurs transformations (généralement réversibles) et se présenter sous plusieurs formes organiques et inorganiques, selon la physicochimie du milieu où ils se trouvent [2, 48]. C'est ce qu'on appelle la spéciation des métaux. Cette spéciation est d'autant plus importante pour des médias très hétérogènes, comme les sols [10].

Pour les métaux, la spéciation est un paramètre crucial puisqu'elle gouverne leur mobilité, leur devenir environnemental, leur disponibilité pour les organismes vivants et les effets écotoxiques associés [3, 6, 49, 50].

La spéciation des métaux englobe l'ensemble des formes physicochimiques comprises dans la concentration totale d'un métal dans l'environnement [22]. Par exemple, lorsqu'un métal est émis dans le sol, il peut se retrouver sous les diverses formes dissoutes, solides ou colloïdales en suspension dans la solution du sol indiquées ci-dessous [22, 23, 51, 52]:

- Métaux dissous : ions libres ou complexes solubles (anions inorganiques ou ligands organiques)
- Fraction échangeable : métaux liés par les forces électrostatiques aux sites de surface chargés négativement des argiles, de la matière organique (MO) et des matériaux amorphes
- Fraction organique : complexes, chélates, ions adsorbés sur la surface de la MO (récemment synthétisée ou décomposée par l'activité microbienne)
- Fraction inorganique : ions adsorbés spécifiquement sur la surface de minéraux argileux, carbonates, phosphates, oxydes de fer (Fe), d'aluminium (Al) et de manganèse (Mn)
- Fraction résiduelle : métaux inclus dans la matrice cristalline des minéraux du sol
- Fraction incorporée dans le matériel biologique du sol

Ces espèces coexistent dans l'environnement et peuvent être ou non en équilibre thermodynamique [53].

La spéciation des métaux peut également inclure des formes métalliques dans lesquels le métal possède différents degrés d'ionisation [54]. En effet, certains métaux et métalloïdes, notamment le Cr, le Cu et le Hg peuvent se trouver sous plusieurs degrés d'ionisation, ce qui affecte leur mobilité, devenir et toxicité dans l'environnement [54]. Par exemple, les espèces trivalentes de Cr sont peu toxiques puisque peu biodisponibles, étant donné qu'elles sont très peu solubles et qu'elles ont tendance à former de forts complexes organiques et inorganiques [55]. En revanche, les espèces hexavalentes de Cr sont très solubles et donc facilement absorbables par les organismes vivants, où elles peuvent exercer des effets toxiques (effets cancérigènes, tératogènes et mutagènes) [55].

Parmi les espèces métalliques, on distingue souvent les formes labiles des métaux, puisqu'elles semblent être liées à l'absorption et la toxicité des métaux pour les organismes vivants [56, 57]. La labilité représente la capacité des ions métalliques à se dissocier de leur ligands [57, 58]. Les formes métalliques les plus labiles sont en général les ions libres dissous ( $M^{2+}$ ), suivies des paires d'ions (ex.  $M-OH^+$ ,  $M-Cl^+$ ,  $M-CO_3$ ) et des formes organiques dissoutes ( $M-MO$  dissoute) [53, 56, 59]. C'est pour cette raison que l'ion libre métallique est souvent le paramètre clé dans les calculs de spéciation [56].

### **1.3.1.2 Spéciation des métaux : principaux facteurs d'influence**

Généralement, les paramètres qui influencent significativement la spéciation des métaux dans l'environnement sont : le pH, la température, le potentiel rédox, la composition et la concentration des autres ions, la teneur et la qualité de la matière organique, la capacité d'échange cationique (CEC), la nature et la concentration d'agents complexants (ex. MO, carbonates), le taux d'humidité, la taille et la quantité des particules de sol et l'activité des microorganismes et des plantes (surtout au niveau de la rhizosphère) [2, 4, 6, 11, 22, 52, 60, 61].

Pour les ions métalliques et les composés organométalliques polaires, le pH est le principal facteur contrôlant la spéciation [2, 4, 62]. Le pH joue notamment un rôle dans la rétention des métaux par les phases solides, puisque l'adsorption est plus fréquente à des pH élevés [22].

La MO est un autre paramètre important, surtout pour les composés organométalliques [2, 6, 63]. D'une part, la MO solide (principalement les composés humiques) retient les métaux dans les phases solides du sol et limite leur transport dans l'environnement; d'autre part, la MO permet la formation de complexes organiques solubles et peut augmenter la biodisponibilité des métaux [64-67]. De plus, la qualité de la MO influence sa capacité de sorption pour les métaux [68].

### **1.3.2 Biodisponibilité des métaux**

La disponibilité environnementale fait référence à la capacité du métal à interagir avec d'autres matrices de l'environnement et d'expérimenter divers processus de devenir et de transport [2, 6]. Les métaux disponibles ne sont pas séquestrés dans une matrice environnementale et représentent donc la fraction de métaux potentiellement biodisponible dans un système, c'est-à-dire celle capable d'entrer en contact avec ou de pénétrer dans un organisme vivant à un moment donné et pour des conditions environnementales particulières [2, 6].

La disponibilité et le devenir environnementaux des métaux dans les sols sont principalement contrôlés par leur distribution entre les phases solides et dissoutes du sol et cette distribution est fonction des caractéristiques du sol [4, 23, 61]. En effet, les plantes absorbent généralement les métaux via la solution du sol [63].

### **1.3.3 Distribution des métaux dans les sols et coefficients de partition**

La distribution et la mobilité des métaux dans les sols et les concentrations dans l'eau interstitielle du sol peuvent être modélisées en utilisant des coefficients de partition sol-eau [7, 69]. Le coefficient de partition sol-eau ( $K_d$ ) est le ratio de la concentration du contaminant sorbé sur les particules solides par rapport à la concentration du contaminant dissout dans la solution du sol à l'équilibre [7, 69]. Pour les métaux, le coefficient  $K_d$  dépend de plusieurs caractéristiques physicochimiques des phases solides et de la solution du sol, ce qui limite l'utilisation d'une valeur générique du  $K_d$  [23].

Il est possible toutefois d'estimer le coefficient de partition  $K_d$  des métaux lourds à partir d'un modèle de régressions multiples qui permet de souligner l'influence de plusieurs paramètres du sol, notamment le pH, la MO, la CEC, la présence d'oxydes de fer et d'Al sur les processus de dissolution des métaux et de réduire considérablement les incertitudes associées à l'estimation du  $K_d$  pour les métaux [7, 49, 68, 69].

McBride et al. (1997) ont d'ailleurs établi des relations semi-empiriques reliant l'activité du métal dans la solution de sol, le pH, le contenu en MO et le contenu total en métaux du sol pour le Cu, le Zn, le Cd et le plomb (Pb) [68]. Cancès et al. (2003) ont également obtenu des relations pour la spéciation du Cd, du Cu, du Zn et du Pb et Carlon et al. (2004) ont obtenu des relations pour Pb [49, 69]. Sauvé et al. (2000), quant à eux, ont compilé les valeurs de  $K_d$  pour le Cd, le Cu, le Pb, le Zn et le Ni pour déterminer les valeurs intéressantes à utiliser dans les modèles de devenir et ont identifié l'influence de différents paramètres du sol comme le pH, le contenu total en métaux et la teneur en MO sur les valeurs de  $K_d$  [7].

### 1.3.4 Essentialité des métaux

Certains métaux, comme le Fe, le Cu, le Mn, le Zn, le Cr et le cobalt (Co) sont essentiels à de faibles concentrations pour la santé humaine, pour les animaux, plantes et microorganismes et une carence en ces éléments peut engendrer des effets nocifs [4, 5, 52, 60]. D'un autre côté, un excédent de métaux essentiels peut générer des effets néfastes sur les organismes vivants [2, 6]. D'autres métaux, comme le Hg, le Pb, le Cd et l'Al sont toxiques peu importe leur concentration [2, 4-6]. Ces seuils de toxicité doivent être considérés dans la détermination des effets des métaux sur les organismes vivants [6, 52].

### 1.3.5 Le cas du Zn : exemple d'un élément trace essentiel

Faiblement répandu dans la croûte terrestre, le Zn fait partie de ce qu'on appelle les métaux trace [70]. Ce métal est un élément essentiel, puisqu'il entre notamment dans la composition de plusieurs enzymes (ex. déshydrogénases, protéinases, peptidases, phosphorylases) [58, 70]. Cependant, il peut provoquer des effets néfastes si les concentrations sont trop importantes ou si une carence se produit chez les organismes vivants [70].

#### 1.3.5.1 Spéciation et distribution du Zn dans les sols

Dans l'environnement, on retrouve de nombreuses espèces de Zn. Par exemple, dans la solution du sol, le Zn peut se retrouver sous les formes suivantes :  $Zn^{2+}$ ,  $ZnCl^+$ ,  $ZnOH^+$ ,  $ZnHCO_3^+$ ,  $ZnO_2^{2-}$ ,  $Zn(OH)_3^-$ ,  $ZnCl_3^-$  [70]. Parmi les composés solides possibles de Zn, on retrouve :  $Zn(OH)_2$ ,  $ZnCO_3$ ,  $ZnCl_2$ ,  $ZnO$ ,  $ZnSO_4$  et  $ZnS$  [70].

Chadi et al. (2008) ont trouvé que la distribution du Zn entre les phases solides et la solution de sol variaient considérablement d'un échantillon de sol contaminé à un autre (coefficients de partition  $K_d$  entre 17 et 13 100 L/kg), ce qui est en accord avec la tendance générale pour les métaux [71]. Nolan et al. (2003) ont quant à eux trouvé des coefficients de partition  $K_d$  variant entre 1240 et 91 800 L/kg [72].

Chadi et al. (2008) ont également évalué que l'ion libre dans la solution du sol représentait entre 40-60% du Zn labile et que la fraction de Zn dissout dans la solution de sol représentait entre 0,006 et 17% de la quantité totale de Zn dans les échantillons de sol [71]. Dans cette fraction dissoute, le Zn libre représentait entre 0,1 et 21% (moyenne de 8%) [71]. Brennan (2005) a quant à lui trouvé que l'ion libre ( $Zn^{2+}$ ) représentait entre 15 et 30% du Zn contenu dans la solution de sol d'un loam sableux [58]. Nolan et al. (2003) ont déterminé que la proportion de Zn sous forme d'ion libre se situait entre 2,3 et 87% pour les sols agricoles [72].

Les résultats de ces études indiquent que la distribution du Zn est très variable selon les types de sols et qu'il est nécessaire de regarder l'influence des paramètres physicochimiques du sol pour calculer sa spéciation.

### **1.3.5.2 Spéciation du Zn dans les sols : principaux paramètres d'influence**

Les facteurs qui affectent la spéciation du Zn incluent: le contenu total en Zn, le pH, le carbone organique, le potentiel rédox, le contenu en argiles (silicates), carbonates, phosphates et en oxydes de Fe et Al (ligands potentiels), l'activité microbienne, les régimes hydriques du sol, la distribution des racines et les effets rhizosphériques associés et la présence d'autres cations pouvant entrer en compétition pour les mêmes sites de fixation [58, 63, 70].

#### *Le pH*

La spéciation du Zn est fortement influencée par le pH de la solution du sol et du sol [70]. En effet, Chadi et al. (2008) ont déterminé qu'environ la moitié de la variance de l'activité du Zn libre est associée au pH [71]. Nolan et al. (2003) ont également conclu que le pH est le facteur principal influençant le coefficient de partition  $K_d$ , puisque 50% de la variabilité de ce coefficient est associée au pH [72]. De plus, Brennan (2005) a trouvé que presque la totalité du Zn est labile (99%) à un pH de 4,4 et cette proportion passe à 22% à un pH de 7,5 [58].

À des valeurs de pH acides, le Zn se retrouve principalement sous forme d'ion libre [70]. L'ion libre  $\text{Zn}^{2+}$  était notamment l'espèce dominante dans un sol latéritique podzolique pour des valeurs de pH entre 3,8 et 6,5 [58]. Knight et al. (1998) ont observé que la fraction de Zn sous forme d'ion libre demeurait constante (autour de 80%) pour des valeurs de pH entre 4 et 6,9 [71, 73]. Wu et al. (2000) ont trouvé que le Zn libre en solution constituait environ 72% de la fraction dissoute [71, 74].

Ainsi, à de faibles valeurs de pH, les activités du Zn soluble et du Zn libre sont presque les mêmes [75]. Cependant, ceci n'est pas le cas à des valeurs de pH élevées, à cause des espèces hydrolysées et des espèces organiques [75]. En effet, dans des sols alcalins ou neutres,  $\text{Zn}(\text{OH})^+$  est une espèce dominante dans la solution du sol [58, 75]. De plus, il semble que le Zn réagisse avec des minéraux argileux et aux oxydes à des valeurs de pH élevées [58, 75]. Près de la neutralité, des réactions d'adsorption sur la MO se produisent [75, 76]. Les complexes organiques seraient les espèces dominantes de Zn à un pH de 7,5 [63, 70]. Le tableau 1.2 présente la spéciation du Zn en fonction du pH.

Tableau 1.2 Spéciation du Zn dans les sols en fonction du pH

pH	Espèces de Zn
< 6-7	$\text{Zn}^{2+}$ [63, 70, 75]
~7 (7,5)	Complexes organiques de Zn [63, 70, 75, 76]
> 7,5	$\text{Zn}(\text{OH})^+$ dans la solution du sol et aussi adsorption sur les minéraux argileux et oxydes [58, 75]

#### *Le potentiel rédox*

Les fluctuations dans le statut rédox peuvent déterminer la mobilité et la disponibilité du Zn [77]. Bostick et al. (2001) ont trouvé que dans des sols secs et oxydés, presque tout le Zn est adsorbé sur les hydroxydes ou sous la forme de  $\text{ZnO}$ , alors qu'il est lié aux sulfures et carbonates dans les systèmes inondés anoxiques [77]. Ceci est confirmé par Landner et Reuther (2005) qui ont trouvé que  $\text{ZnS}$  et  $\text{ZnCO}_3$  sont formés lors d'une réduction du potentiel rédox associée à l'inondation du sol [52].

Bostick et al. (2001) ont d'ailleurs conclu dans leur étude que les variations spatiales dans la concentrations du Zn n'influençaient pas autant la spéciation du Zn que les changements en potentiel rédox [77].

### *Le contenu en MO et en ligands inorganiques*

La MO du sol d'une part aide le Zn à s'adsorber sur les phases solides du sol et donc diminue les quantités en solution [71]. D'autre part, elle génère plus de carbone organique dissout et aide la formation de complexes organiques, ce qui entraîne une plus grande concentration de Zn en solution [71, 78]. Ce rôle dual a été souligné également par Hassan (2003). Cet auteur a montré que lorsque le ratio  $[Zn]/[Carbone\ organique\ dissout]$  est faible, le Zn forme des complexes relativement inertes avec les substances humiques, étant donné la forte affinité des sites de fixation sur ces substances [53]. À des ratios élevés, le Zn forme des complexes labiles, puisqu'il se lie aux sites de fixation de faible affinité des substances humiques [53].

Chadi et al. (2008) ont montré que le Zn lié à la MO représentait entre 60 et 98% (et en moyenne 88%) du Zn total dans les échantillons de sol étudiés [71]. Cette étude a révélé que la MO influence principalement la spéciation du Zn par la complexation des métaux dans la solution du sol plutôt que par la fixation des métaux sur la MO solide du sol [71]. Bertling et al. (2006) affirment que la MO est un ligand beaucoup plus fort du Zn que les oxydes de Fe et les minéraux d'argiles [78].

Le rôle de la MO dans la spéciation du Zn est toutefois controversé [75]. En effet, McBride et al. (1997) ont indiqué que la fraction soluble de Zn n'était pas affectée par la MO [68, 75]. Carlon et al. (2004) ont également affirmé que le Zn n'a pas tendance à se lier fortement avec les complexes organiques solubles [69].

Outre la MO, les argiles semblent adsorber le Zn assez fortement [58, 76, 78]. En effet, Barrow (1986) a indiqué que contrairement au Cu, le Zn semble réagir fortement avec les composants inorganiques du sol au lieu de la MO [79]. Ceci est corroboré par Kabata-Pendias et Mukherjee (2007) qui indiquent que le contenu en argiles peut contrôler jusqu'à 60% du Zn dans les sols [70]. Les hydroxydes de Fe, d'Al et de Mn seraient des ligands importants pour le Zn [70].

De plus, la présence d'anions sulfure semble favoriser l'adsorption du Zn sur les composés organiques et les minéraux du sol [70, 77].

### *La température*

Pour une réaction chimique, l'augmentation de la température peut changer la cinétique de réaction et changer la position de l'équilibre [79]. L'hydrolyse des ions Zn pour donner  $\text{ZnOH}^+$  est endothermique et donc une augmentation de la température augmente la proportion des ions  $\text{ZnOH}^+$  [79]. De plus, la concentration de Zn en solution décroît avec l'augmentation du temps et de la température [79].

### *Les relations entre les paramètres*

Plusieurs études ont tenté d'établir des relations entre certaines concentrations de Zn, notamment la concentration soluble ou l'activité de l'ion libre et les paramètres principaux du sol, dont le pH, la concentration totale de Zn dans le sol, le contenu en MO [58, 63, 71, 72, 75]. Ce type de relation peut être utilisé pour obtenir la concentration biodisponible nécessaire pour évaluer les impacts environnementaux des métaux (voir section 1.5.2).

### *La biodisponibilité du Zn*

Sous des conditions acides, le Zn libre est un des cations traces divalents les plus solubles et les plus mobiles et donc souvent un des plus phytotoxiques après Al et Mn libres [52, 71, 80, 81]. Les plantes absorbent généralement le Zn sous forme de cation divalent  $\text{Zn}^{2+}$ , bien que la forme  $\text{ZnOH}^+$  soit également une espèce importante pour l'adsorption et l'absorption par les plantes [58, 78].

## **1.4 Controverses et limites de l'ACV : intégration des particularités des métaux**

### **1.4.1 Concentration totale et spéciation**

Actuellement, les calculs reliés à l'établissement des critères environnementaux et à l'évaluation des impacts écotoxicologiques des métaux sont fréquemment effectués en utilisant la teneur totale en métaux dans les sols et les eaux naturelles [7, 82]. De la même manière, certains modèles utilisés en ACV considèrent que la quantité totale émise des métaux est susceptible de générer des effets toxiques, la spéciation étant généralement omise dans les modèles utilisés en ACV [12, 37].



Cependant, à cause de la spéciation et de l'affinité des métaux pour les surfaces réactives du sol, la teneur totale n'est pas l'indicateur de toxicité le plus adéquat pour les métaux [5, 23]. Utiliser la concentration totale de métaux pour évaluer leur toxicité serait valide uniquement si toute la quantité de métaux est accessible aux organismes vivants [53]. Or, certaines formes métalliques sont tellement inertes (ex. les métaux inclus dans la structure des minéraux du sol et libérés uniquement par digestion avec des acides forts) qu'elles n'influencent pratiquement pas la quantité de métaux se trouvant dans la solution du sol, alors que d'autres formes très solubles (ex. les ions libres), contribuent considérablement à alimenter la quantité de métaux dans l'eau interstitielle [23]. Considérer les fractions inertes dans l'évaluation des impacts pourrait induire en erreur [23].

Pour pallier à ce problème, en analyse des risques, des modèles permettant d'obtenir la fraction d'ion libre ont été développés [11]. C'est le cas du modèle FIAM (Free Ion Activity Model). Le modèle FIAM stipule que la toxicité métallique est reliée à l'absorption d'espèces métalliques spécifiques à l'interface organisme-eau et que l'ion libre en solution est un meilleur indicateur de la toxicité que la concentration totale dissoute du métal [83-85]. Le modèle FIAM ne stipule pas que l'ion libre est la seule espèce biodisponible, il suggère uniquement que dans un système à l'équilibre l'étendue des réactions de complexation incluant celles qui contrôlent le taux d'absorption sont déterminées par la concentration de l'ion libre peu importe le mécanisme de réactions [86]. Contrairement aux systèmes aquatiques, les propriétés de la phase solide et la cinétique des réactions à l'interface solide-liquide influencent considérablement la chimie des solutions de sol [23]. Ainsi, l'application du modèle FIAM aux systèmes terrestres est plus difficile notamment à cause de la complexité et de l'influence prédominante des processus hétérogènes suivants : adsorption-désorption; précipitation-dissolution; absorption-dégagement, et autres qui tamponnent et obscurcissent les échanges entre les phases solides et la solution du sol [23]. Des incertitudes supplémentaires sont ajoutées au modèle FIAM lorsqu'il est appliqué dans les sols, puisque les complexes métalliques peuvent aussi être absorbés par les plantes et que les effets de la rhizosphère peuvent être non négligeables, ce qui n'est pas pris en compte dans ce modèle [63, 83, 84, 86]. De plus, l'absorption de métaux n'entraîne pas forcément un effet nocif pour les organismes [87].

Certaines méthodes en ACV utilisent également ce concept d'ion libre. C'est le cas de la méthode IMPACT 2002+ où les FC des métaux sont évalués pour l'ion libre [44]. Ceci implique

que la méthode ne s'applique que pour les métaux ayant été émis sous cette forme et suppose que les émissions métalliques sont répertoriées ainsi dans l'inventaire du cycle de vie [44]. Si les FC disponibles dans la méthode IMPACT 2002+ ne sont pas appliqués uniquement aux émissions d'ions libres, les impacts écotoxicologiques peuvent être largement surestimés [44]. En effet, la forme ionique est souvent plus toxique que la plupart des autres formes. Si on considère que toutes les concentrations métalliques émises sont sous la forme la plus toxique alors que les métaux ont été émis sous une forme beaucoup moins biodisponible, on risque effectivement d'obtenir des résultats d'impact très élevés, probablement trop élevés aussi. Or, il n'est pas toujours facile de connaître la forme sous laquelle ou les formes sous lesquelles les métaux sont émis dans l'environnement et les FC peuvent être utilisés tels quels dans les ACV. Ceci augmente donc l'incertitude sur les résultats d'impacts écotoxicologiques et fait perdre de la crédibilité aux résultats des ACV. Humbert et al. (2005) affirment d'ailleurs que les incertitudes pour les résultats d'impacts sur l'écotoxicité sont très élevées [44].

Un autre problème avec les modèles utilisés en ACV est le fait qu'ils reposent sur le concept d'espèce unique, ce qui ne représente pas le cas des métaux du fait de leur spéciation [11].

De plus, les modèles en ACV ne considèrent parfois que la forme émise, ce qui n'est pas représentatif des métaux, puisque la forme la plus toxique peut être une espèce issue de transformations ultérieures à l'émission dans l'environnement [11].

Ainsi, il est donc crucial de déterminer la concentration de métaux dans les sols qui constitue le pool échangeable, soit la quantité potentiellement biodisponible et utiliser cette concentration pour évaluer les impacts écotoxicologiques des métaux [23, 61, 64, 87].

### **1.4.2 Biodisponibilité et controverses**

Actuellement en ACV, la biodisponibilité des composés organiques, et par le fait même des métaux, est modélisée en considérant qu'elle est limitée seulement par la sorption des composés sur les grosses molécules organiques ou sur les phases solides hydrophobes [11]. Or, la biodisponibilité des métaux n'est pas uniquement contrôlée par les interactions hydrophobes mais dépend de la présence d'agents complexants comme la MO et d'autres ions [11]. Pour les métaux, le coefficient de partition octanol-eau ( $K_{ow}$ ) ne s'applique pas, contrairement aux

composés organiques [11]. Il est donc nécessaire de définir la biodisponibilité des métaux en fonction de leurs propres caractéristiques.

Or, la définition de la biodisponibilité des métaux est encore un sujet controversé. Il a été suggéré d'une part que la biodisponibilité des métaux dans les sols puisse être représentée par l'activité des ions libres dans la solution du sol [88]. Nolan et al. (2003) affirment d'ailleurs qu'utiliser l'activité de l'ion libre a permis d'améliorer les prédictions concernant la bioaccumulation et la toxicité des métaux [72].

Cependant, il ne faut pas oublier les autres formes métalliques labiles qui regroupent notamment les complexes organiques et inorganiques dissous, et certaines espèces métalliques solides [52]. Certains complexes hydrophobes sont capables de traverser la membrane cellulaire des organismes vivants sans devoir se dissocier [53]. Selon Antunes et al. (2006), l'hypothèse de l'ion libre est en fait réaliste uniquement pour les sols très contaminés aux métaux [85]. Dans des sols qui renferment de faibles concentrations en métaux, les complexes métalliques peuvent jouer un rôle considérable dans l'absorption de métaux par les plantes [85]. Les négliger pourrait donc conduire à des évaluations environnementales erronées.

Il est également possible d'approximer la quantité de métaux biodisponibles en prenant la quantité de métaux dissous, puisque les métaux sont généralement absorbés par les organismes vivants via la solution du sol [52]. D'autres ont aussi proposé d'utiliser la fraction vraiment dissoute, qui inclut les ions libres et les paires d'ions, pour représenter la fraction biodisponible des métaux [13].

Une de ces hypothèses n'est pas nécessairement l'unique réponse pour représenter la fraction biodisponible des métaux. Il faut garder en tête les buts recherchés par les études environnementales. Par exemple, dans les analyses des risques pour l'environnement où l'objectif principal est de caractériser les risques encourus par un écosystème donné pour un site contaminé précis, il est important de très bien définir la fraction métallique biodisponible pour ne pas omettre une voie d'exposition importante. Dans ces cas, il faudrait donc inclure toutes les formes métalliques susceptibles d'être absorbées par les organismes vivants. Cependant, pour des méthodes plus génériques, comme l'ACV, où l'on cherche à évaluer un impact potentiel moyen, il n'est pas forcément possible et même nécessaire d'atteindre ce niveau de détails. Il faut peut-être plutôt songer à définir la fraction biodisponible le plus sommairement possible tout en

s'assurant de ne pas s'éloigner démesurément de la réalité. L'hypothèse de relier la biodisponibilité à l'activité de l'ion libre pourrait donc s'avérer un choix approprié. Il faut toutefois garder en tête que si des espèces biodisponibles sont négligées dans les calculs, cela ne veut pas dire qu'elles n'ont pas d'impact. Il est donc bien important de spécifier les hypothèses formulées et les conséquences potentielles des choix de modélisation effectués.

### 1.4.3 Effets écotoxiques des métaux

En ACV, l'effet écotoxique des métaux est représenté par un FE qui représente le nombre probable d'incidences d'un effet écotoxique sur les organismes vivants en fonction d'une quantité absorbée [25].

Certains modèles recommandent d'utiliser la méthode AMI pour obtenir les FE [10, 33-35]. Cette méthode requiert des données écotoxicologiques couvrant au moins trois niveaux phyla afin de bien représenter la variabilité biologique de l'écosystème [10].

Or, les données écotoxicologiques terrestres pour les métaux ne sont pas toujours disponibles [10]. Haye *et al.* (2007) ont toutefois montré qu'il était possible d'obtenir une valeur chronique de  $HC50_{EC50}$  pour les métaux et métalloïdes suivant : As(III) ou (V), Be(II), Cr(III) ou (VI), Sb(III) ou (V), Pb(II), Cu(II), Zn(II) et Ni(II) [10]. Un autre problème concernant les données écotoxicologiques terrestres des métaux est leur hétérogénéité : certaines  $EC_{50}$  sont calculées en utilisant la concentration totale, d'autres sont en terme de concentration soluble ou d'ion libre. En d'autres termes, les valeurs d' $EC_{50}$  ne sont pas nécessairement calculées en fonction de la fraction susceptible de causer un effet toxique. Christiansen *et al.* (2014) ont inclut la spéciation dans le calcul des FE pour l'écotoxicité aquatique d'eau douce pour le Cu en modifiant avec un modèle géochimique de spéciation les  $EC_{50}$  pour qu'elles soient en fonction de l'ion libre ( $Cu^{2+}$ ) (voir section 1.5.1) [18]. Cette approche requiert cependant des données d'entrée sur les conditions environnementales ayant permis d'obtenir les données écotoxicologiques, ce qui est rarement disponible pour les données écotoxicologiques terrestres. Or, une partie de la variabilité observée entre les  $EC_{50}$  pourrait être attribuable aux différents types de sols utilisés pour les tests écotoxicologiques [89, 90].

Lorsque les données écotoxicologiques terrestres ne sont pas disponibles, les FE pour le sol sont généralement estimés par extrapolation des FE pour les écosystèmes aquatiques pour la

même substance en utilisant les coefficients de partition eau-sol ( $K_d$ ) [10]. Cette approche pose plusieurs problèmes. Premièrement, il suppose que les organismes vivants terrestres auront une sensibilité face à une contamination en métaux qui soit équivalente à celle des organismes aquatiques. Un autre problème est relié au coefficient de partition défini comme étant le ratio de la concentration du métal adsorbé sur les particules solides par rapport à la concentration du contaminant dissout dans la solution du sol à l'équilibre [7, 69]. Or pour les métaux, ce coefficient dépend des caractéristiques physicochimiques du milieu et l'écart peut être assez important, ce qui complique le choix d'une valeur générique. Par exemple, le coefficient de partition pour le Zn peut varier de 6 ordres de grandeur ( $\log K_d$  (l/kg) variant entre -1 et 5) [91].

Il est possible toutefois d'estimer le coefficient de partition des métaux à partir d'un modèle de régressions multiples qui permet de souligner l'influence de plusieurs paramètres du sol [7, 49, 68, 69]. Cependant, les relations empiriques ne sont généralement pas applicables en dehors du contexte initial qui a permis de les établir [20].

#### **1.4.4 Concentrations naturelles**

Étant donné que les métaux se trouvent naturellement dans l'environnement, les concentrations métalliques naturelles doivent parfois être incluses comme bruit de fond dans la modélisation du devenir. Landner et Reuther (2005) et Ferguson (1995) soulignent d'ailleurs qu'il est important de tenir compte des concentrations naturelles de métaux dans les sols, puisque le même niveau de contamination peut engendrer un effet écotoxique à un site, alors qu'il est inoffensif dans un autre site [23, 52, 92].

L'utilité des concentrations de bruit de fond pour des analyses comparatives a toutefois été mise en doute par [37]. L'auteur stipule que dans des études comparatives, intégrer le bruit de fond ne servirait à rien puisqu'il s'annulerait lors de la comparaison des scénarios.

L'hypothèse de l'annulation du bruit de fond dans les analyses comparatives n'est pas nécessairement valide pour les ACV, puisque les différents scénarios comparés ne font pas forcément intervenir les mêmes lieux d'émission. Ainsi, le bruit de fond ne serait pas le même et ne pourrait donc pas s'annuler.

Un groupe de travail s'est réuni à Clearwater pour recommander une méthode permettant de développer les FC des métaux pour l'écotoxicité aquatique en ACV [13] (voir section 1.4.8).

Ce groupe suggère, quant à lui, de considérer les variations dans les conditions naturelles par la création d'archétypes de mêmes propriétés. Chaque archétype aurait sa propre valeur de concentration de bruit de fond pour chaque métal présent.

### **1.4.5 Essentialité des métaux**

En ACV, l'impact des quantités de substances émises est estimé en utilisant un modèle linéaire d'effet basé sur l'hypothèse que chaque émission, même petite, d'une substance dans un écosystème, produira un effet [10]. Or, ce principe ne s'applique pas pour les métaux essentiels pour lesquels une carence est aussi néfaste qu'un surplus [12].

### **1.4.6 Séquestration définitive des métaux**

La séquestration définitive des métaux signifie que les cinétiques de libération de certaines fractions sorbées de métaux sont tellement lentes qu'elles sont vues comme étant pratiquement impossibles comparativement aux autres réactions impliquant les métaux. Or, parfois, comme c'est le cas en ACV, la modélisation se fait sur de très grandes échelles temporelles (des centaines d'années). On peut donc se demander jusqu'à quel point il faut inclure tous les processus de séquestration des métaux, puisque leur vitesse peut s'approcher de celle des processus géologiques [37].

Bachman (2006) suggère d'utiliser des  $K_d$  mesurés pour des sols naturels et calculés à partir de la concentration totale en éléments (dissolution par acides forts comme HF). Selon lui, ces coefficients tiennent compte des processus de sorption, puisque dans les sols naturels, il y a eu suffisamment de temps pour que ces processus se produisent. Cependant, Nolan et al. (2003) ont toutefois souligné que l'utilisation des concentrations totales pour décrire la distribution des métaux dans les sols mène à des  $K_d$  plus élevés, puisque le métal qui n'est pas en équilibre avec la phase aqueuse est inclus dans les calculs [72].

Il est également possible de tenir compte de la séquestration définitive des métaux en la formulant comme perte de métaux du système modélisé. Ceci ne permet toutefois pas de considérer cette fraction comme étant possiblement absorbable (et donc possiblement toxique) par les plantes (Bachmann, 2006).

Une autre possibilité est d'introduire un autre compartiment représentant seulement la fraction non réactive du métal, qui serait libérée très lentement, mais ceci augmente le nombre de compartiments des modèles et par le fait même le nombre d'équations à traiter (Bachmann, 2006).

### **1.4.7 Complexité des métaux**

Chaque espèce métallique a des propriétés différentes qui influencent sa biodisponibilité et qui mènent à un devenir environnemental différent, ce qui pose des limites sur les généralisations pouvant être faites dans l'évaluation des impacts des métaux [2, 3, 5]. Puisque la spéciation est spécifique à chaque métal, un modèle global n'est pas approprié [11, 65]. D'un autre côté, les modèles qui considèrent la spéciation deviennent fortement dépendants des conditions du milieu [11].

Les relations entre sources, devenir, exposition et effets des métaux sur les récepteurs écologiques sont complexes et sont souvent spécifiques à un site, à des conditions environnementales et à un organisme récepteur [6]. Puisque les métaux sont des substances que l'on retrouve naturellement dans l'environnement et étant donné leur cycle biogéochimique, ces relations sont plus intimement liées aux processus naturels que pour les composés organiques [6].

Ainsi, pour évaluer adéquatement l'impact local d'un métal, il est nécessaire de connaître la forme sous laquelle il est émis dans l'environnement, les conditions environnementales, notamment, les conditions climatologiques, la géochimie du sol, la chimie des eaux et sédiments, la présence de plantes et/ou d'animaux susceptibles d'accumuler le métal, les facteurs d'absorption pour toutes les formes du métal qui risquent d'être présentes dans l'environnement, les voies d'exposition plausibles pour les récepteurs écologiques et l'effet que le métal aura sur les organismes cibles en fonction de l'exposition [6].

L'enjeu majeur en ACV pour le traitement des métaux est le fait qu'il faut unir d'une part, une méthode globale qui requiert l'agrégation des polluants et donc une perte de données et le caractère très régionalisé de la plupart des modèles environnementaux qui requièrent des informations très détaillées sur les lieux d'émission des polluants [28, 93]. Or, les lieux d'émission ne sont pas tous connus en ACV, ce qui limite l'approche spatialisée [28, 65], d'où l'intérêt de non seulement développer une approche spécifique aux métaux mais surtout de

calculer les incertitudes associées au scénario où il est impossible d'utiliser une approche spécifique.

### 1.4.8 Groupes de travail sur les métaux

Un groupe de travail de l'initiative sur le cycle de vie du PNUE et de la SETAC réunit à Apeldoorn avait pour objectif de fournir des informations sur les enjeux associés à la caractérisation des métaux par les méthodes disponibles en ACV, principalement en ce qui a trait à l'écotoxicité [12]. Le groupe a reconnu que les méthodes actuelles en ACV accordent souvent une importance inadéquate aux impacts des métaux [12]. Le groupe a suggéré entre autre d'inclure la spéciation dans la phase d'inventaire de l'ACV et de reporter les émissions métalliques en termes d'espèces chimiques, préférablement en termes de métaux dissous plutôt que de concentrations totales émises [12]. Dans le contexte de l'ACV, ce n'est pas toujours facile de répertorier toutes les émissions en termes d'espèces chimiques. En effet, chaque ACV considère des émissions provenant de milliers de processus répartis partout dans le monde. Il n'est donc pas toujours possible de récolter des données précises sur chaque lieu d'émission dans l'inventaire. De plus, le fait de tenir compte de la spéciation uniquement dans la phase d'inventaire ne tient pas compte des espèces métalliques issues de transformations ultérieures à l'émission. En effet, la spéciation des métaux peut changer lorsque les métaux rejoignent un autre compartiment d'émission ou lorsqu'ils rencontrent d'autres conditions physicochimiques.

Lors d'un second groupe de travail de l'initiative sur le cycle de vie du PNUE et de la SETAC réuni à Clearwater, un consensus a été atteint pour recommander une méthode permettant de développer les FC des métaux pour l'écotoxicité aquatique en ACV [13]. Ce groupe a suggéré d'intégrer la fraction dissoute des métaux dans la modélisation de leur devenir, d'ajouter un facteur de biodisponibilité (FB) dans le calcul des FC (en plus des FD et FE) et de regrouper les eaux douces en archétypes de propriétés similaires [13]. Ils suggèrent d'introduire un FB défini comme étant le ratio de la concentration vraiment dissoute (incluant les ions libres et les paires d'ions) et de la concentration totale dans le compartiment [13]. Les auteurs suggèrent d'obtenir le FB par le biais d'un modèle géochimique de spéciation, et plus précisément, en utilisant le modèle WHAM 6.0, car il est le plus couramment utilisé de sa catégorie et qu'il permet de prendre en compte la complexité de la MO [13].



## 1.5 Intégrer la spéciation des métaux en ACV : percées en écotoxicité aquatique et terrestre

### 1.5.1 Utiliser un modèle géochimique de spéciation pour intégrer la spéciation pour 14 métaux cationiques en écotoxicité aquatique

Faisant suite aux recommandations du groupe de travail réuni à Clearwater (voir section 1.4.8), Gandhi *et al.* ont développé un cadre méthodologique et ont obtenu des FC incluant la spéciation des métaux pour 6 métaux (Co(II), Cu(II), Cd (II), Ni(II), Pb(II) et Zn(II)) pour 7 archétypes d'eaux douces, la fraction biodisponible étant obtenue avec le modèle géochimique de spéciation WHAM 6.0 [14-16]. Le modèle WHAM 6.0 a également été utilisé pour convertir les données écotoxicologiques utilisées pour obtenir le FE en fonction de la fraction biodisponible du métal [14]. Les archétypes ont été définis en fonction de la variabilité de trois propriétés principales (pH, carbone organique dissout et dureté) qui influencent la spéciation des métaux dans l'eau douce, chaque archétype regroupant toutes les eaux douces ayant la même combinaison de propriétés (ex. l'archétype 1 regroupe toutes les eaux douces ayant un pH élevé, une dureté moyenne et un contenu moyen en carbone organique dissout) [14]. Les nouveaux FC ont été testés dans 2 études de cas : un système de gouttières en Zn et un système de circuits de tuyautage en Cu [16]. Les résultats montrent que le fait d'inclure la spéciation des métaux modifie de manière significative la contribution de chaque métal au score total pour l'écotoxicité aquatique et la valeur des scores pour l'écotoxicité aquatique attribuables aux émissions métalliques, qui avaient diminué de 1 à 4 ordre de grandeur [16].

Cette approche a par la suite été uniformisée et étendue à 14 métaux cationiques (Al(III), Ba, Be, Cd, Co, Cr(III), Cs, Cu(II), Fe(II), Fe(III), Mn(II), Ni, Pb, Sr and Zn) en utilisant les mêmes 7 archétypes d'eaux douces par Dong *et al.* [17]. Les auteurs ont conclu que la différenciation spatiale était importante pour des métaux comme Al(III), Be, Cr(III), Cu(II) et Fe (III), qui forment des complexes hydroxydes dans des eaux légèrement alcalines. En effet, les FC obtenus pour ces métaux présentaient des variations de 2,4 à 6,5 ordres de grandeur, ce qui justifie d'utiliser des archétypes. Cependant, pour des métaux comme Cd, Mn, Ni et Zn, pour lesquels le pH a une moins grande influence et qui ont des coefficients de partition (avec le carbone organique dissout et les particules solides) élevés, la différenciation spatiale est moins

importante, les FC, variant uniquement dans des intervalles de 0,7 à 0,9 ordres de grandeur. Pour les autres métaux, la différence est encore plus faible (environ 0,4 ordre de grandeur). Des FC agrégés ont été calculés par plusieurs méthodes et les valeurs génériques de FC obtenues étaient soit similaires ou plus élevées, l'écart allant jusqu'à environ 2 ordres de grandeur par rapport aux FC utilisés actuellement (USEtox et USES-LCA).

Dong *et al.* (2014) ont également testé plusieurs méthodes permettant d'obtenir des FC agrégés, étant donné qu'il n'est pas toujours possible en ACV d'utiliser des FC régionalisés, vu le peu d'informations disponibles parfois sur les lieux d'émission. Premièrement, en supposant qu'il y a une probabilité équivalente de recevoir une émission dans chacun des archétypes, la moyenne géométrique et la moyenne arithmétique des FC des 7 archétypes ont été calculées. Une tendance moyenne pour chaque métal dans une eau ayant des caractéristiques moyennes a été calculée en considérant des valeurs moyennes pour chaque propriété (sans la variabilité spatiale). Ils ont également calculé un FC générique en considérant que la probabilité qu'une émission ait lieu dans un archétype particulier est liée aux émissions totales dans cet archétype. C'est cette dernière méthode qui est recommandée par Dong *et al.* (2014), puisqu'elle prend en compte la probabilité d'être un compartiment récepteur.

L'utilisation des archétypes est une approche intéressante en ACV, puisque la plupart des lieux d'émission sont inconnus. En utilisant des archétypes, ceci permet d'obtenir des valeurs par défaut et de quantifier leur variabilité spatiale associée de manière à mieux représenter la variabilité des paramètres qui influencent les FC [14]. Cependant, étant donné que les sols sont plus hétérogènes que les milieux aquatiques, ceci peut complexifier la régionalisation et la définition des archétypes, principalement la sélection des propriétés influentes à prendre en compte.

Bien qu'intéressante, cette approche pourrait également être difficile à appliquer aux sols étant donné l'utilisation d'un modèle géochimique.

Il existe un grand nombre de modèles géochimiques et de logiciels (ex. MINEQL+, MINTEQA, GEOCHEM, WATSPEC, WATEQ, PHREEQ, ECOSAT, ORCHESTRA, WASP, WHAM, NICA-Donnan, HYDRUS, PROFILE), développés et utilisés principalement en analyse des risques pour l'environnement, qui permettent d'obtenir la spéciation des métaux. Ces modèles utilisent des équations de thermodynamique et des paramètres d'entrée sur la

physicochimie du milieu pour représenter les réactions de complexation dans les eaux et la solution du sol, l'adsorption, la précipitation, les cinétiques de réaction et le transport des polluants [6, 22, 49, 51, 63, 85, 94-100]. La plupart de ces programmes sont accompagnés de bases de données contenant les constantes thermodynamiques courantes comme les constantes de complexation pour les espèces inorganiques aqueuses, les produits de solubilité des minéraux, etc. [22, 63, 97].

Ces modèles reposent sur l'hypothèse que les réactions entre les phases solides et liquides du sol sont à l'équilibre [63]. L'approche d'équilibre pour représenter la spéciation suppose que les réactions de complexation sont rapides par rapport aux autres réactions dans l'environnement et que l'on peut utiliser les constantes d'équilibre thermodynamique pour déterminer la distribution des différentes espèces métalliques [57].

Dans plusieurs cas, principalement dans les eaux naturelles, la complexation des métaux est effectivement plus rapide que les autres processus et donc les modèles de spéciation basés sur cette hypothèse d'équilibre fournissent une bonne représentation du phénomène de complexation [57]. Cependant, dans certaines situations, les systèmes naturels peuvent être très loin de l'équilibre [101]. En effet, puisque les sols ne sont pas constitués de métaux purs et puisqu'ils ne sont pas nécessairement à l'équilibre, les modèles sont parfois difficilement applicables à ces milieux hétérogènes [22, 23, 63, 86]. Les modèles ne considèrent pas la cinétique de précipitation-dissolution des solides et les taux de réaction de certains échanges métaux-ligands [23, 63]. Gaabass (2006) affirme d'ailleurs que les hypothèses d'équilibre ne sont peut-être pas satisfaisantes pour des systèmes où la complexation est importante et qu'une approche cinétique serait plus appropriée pour représenter la complexation [86]. Ceci est corroboré par Gandhi (2003) et Fan (2004).

L'approche cinétique a l'avantage de mieux refléter la réalité des eaux naturelles, solutions de sol et échantillons de précipitation, où la libération des métaux est souvent contrôlée cinétiquement, c'est-à-dire que l'équilibre ne peut être atteint dans un temps suffisamment court pour permettre la modélisation en condition d'équilibre [57]. Le problème avec cette approche est le manque d'information disponible sur les cinétiques de réaction des complexes métalliques dans l'environnement, principalement ceux impliquant la MO, étant donné son hétérogénéité [22, 57, 63]. De plus, dans une approche globale comme en ACV, l'intégration de la cinétique

combinée à la complexité et la régionalisation pourrait mener à des systèmes d'équations beaucoup trop complexes à gérer en termes de calculs et de capacité de stockage de données.

Parmi les modèles de spéciation, deux modèles, le WHAM (Windermere Humic Aqueous Model) et le NICA-Donnan (Non-ideal competitive adsorption Donnan model) permettent de modéliser les réactions des métaux avec les composés organiques puisqu'ils considèrent l'hétérogénéité des sites de surface, la compétition entre les ions, les variations stoechiométriques des réactions, les interactions électrostatiques [66, 102-104]. Ces modèles illustrent le caractère multi-ligands des substances humiques et considère la compétition pour la fixation aux groupes fonctionnels et les interactions électrostatiques non-spécifique dans la couche diffuse autour des particules humiques [102]. Cependant, ils ne considèrent pas les réactions de précipitation [53, 105]. En fait, la dernière version du modèle WHAM (version 7) permet seulement de modéliser la précipitation des complexes inorganiques de Fe(III) et Al [106].

Bien qu'ils ne soient pas conçus directement pour les sols, les modèles géochimiques de spéciation sont couramment appliqués aux sols, en utilisant les propriétés de la solution de sol comme paramètres d'entrée du modèle [78, 102, 104, 107-114]. Cependant, il n'y a aucun consensus sur quel modèle et quel paramétrage conviennent le mieux aux sols. En effet, certaines études obtiennent de bonnes prédictions [72, 102], alors que d'autres obtiennent des résultats plus mitigés [107, 111].

Afin de mieux représenter les différents types de réactions impliquées dans la spéciation des métaux dans les sols, certains auteurs ont évalué l'applicabilité d'un assemblage de modèles déjà existants. Ainsi, Bonten *et al.* ont tenté de prédire la sorption du Cd, du Cu, du Ni, du Pb et du Zn en combinant le modèle NICA-Donnan pour représenter les réactions avec la MO, un modèle d'échange non spécifique de type Donnan pour la sorption sur les argiles et un modèle DDL à 2 sites pour les oxydes et hydroxydes métalliques en supposant une additivité simple (la sorption est calculée sur les différentes surfaces séparément et ensuite additionnée pour déterminer la sorption totale) [115]. Les auteurs ont comparé les prédictions de l'assemblage de modèles avec 33 échantillons de sol et la plupart des prédictions obtenues pour le Zn par la combinaison de modèles étaient autour de 0,5 unité log et au-delà de 1 ordre de grandeur pour certains échantillons au contenu élevé en Zn et pour un pH neutre [115].

Cependant, bien que ces modèles puissent sembler être une option attrayante pour combler les lacunes de l'ACV, ils requièrent généralement des informations détaillées sur les conditions locales (pH, minéralogie, teneur en MO, etc.) ce qui est incompatible avec le contexte générique de l'ACV : il est impossible de connaître les conditions locales de chaque lieu d'émission d'un métal au cours du cycle de vie d'un produit [65].

Christiansen *et al.* quant à eux, ont proposé une méthode pour intégrer la spéciation du Cu dans le calcul du FE pour l'écotoxicité d'eau douce [18]. Les auteurs ont utilisé le modèle Visual MINTEQ pour convertir les données d'effet en termes de l'ion libre  $\text{Cu}^{2+}$  pour ensuite utiliser la méthode AMI. Cette approche, bien qu'intéressante, présente les mêmes limites pour son extension aux sols. En effet, l'utilisation de modèle de spéciation requiert des informations détaillées sur les propriétés des sols utilisés pour obtenir les données écotoxicologiques, données qui ne sont généralement pas disponibles en écotoxicité terrestre. Par ailleurs, une part de la variabilité observée pour un même métal, pour un même effet écotoxique et pour une même espèce pourrait être attribuable à une différence de spéciation causée par une différence de propriétés dans les sols utilisés [89, 90].

### **1.5.2 Utiliser des régressions empiriques et un modèle de type ligand biotique pour intégrer la spéciation du Cu et du Ni dans le calcul des FC en écotoxicité terrestre**

Récemment, Owsianiak *et al.* (2013) ont développé une méthode permettant d'obtenir les premiers FC pour l'écotoxicité terrestre pour le Cu et le Ni pour un ensemble de 760 sols non calcaires [19]. Les nouveaux FC obtenus présentaient une variabilité spatiale de 3 et 3,5 ordres de grandeur respectivement pour Cu et Ni (2 ordres de grandeur en considérant un intervalle de confiance de 95%). L'approche préconisée consiste à ajouter un facteur d'accessibilité et un FB dans le calcul du FC. Le premier représente la fraction de la quantité totale de métal dans le sol qui est réactive, celle qui est réellement accessible, c'est-à-dire, celle qui est susceptible de provoquer un impact écotoxicologique. Le second, exprimé en fonction de la fraction réactive, représente la fraction d'ions libres, puisque c'est sous cette forme que le métal entre en contact avec les organismes vivants selon les auteurs. Les auteurs ont obtenu des FD en utilisant le modèle USEtox, mais avec des valeurs modifiées de  $K_d$ . Pour les concentrations naturelles et la proportion d'oxydes de Fe et Al, les auteurs ont utilisé des valeurs médianes en se basant sur les

concentrations mesurées dans les sols européens. Les FE sont calculés en utilisant des modèles TBLM (Terrestrial biotic ligand model) [19].

Dans la dernière décennie, une nouvelle manière de modéliser la toxicité métallique, principalement dans les milieux aquatiques [116]. Le modèle de ligand biotique (BLM) est une approche intéressante puisqu'elle prend en compte la spéciation des métaux et la compétition de cations à la surface des organismes vivants [82, 83, 117, 118]. Cette méthode suppose que la toxicité des métaux dépend des ions libres qui se fixent sur des sites spécifiques sur l'organisme vivant, formant un complexe métal-ligand biotique à l'interface eau-organisme vivant. Les BLM considèrent également la compétition pour les sites de fixation entre le métal à l'étude et les autres cations ( $H^+$ ,  $Ca^{2+}$ ,  $Mg^{2+}$ ,  $K^+$ ,  $Na^+$ ), ce qui pourrait diminuer la toxicité.

Récemment, ce concept, renommé TBLM (terrestrial BLM) a été appliqué aux sols, principalement pour le Cu et le Ni [112, 113, 119-121] et dans quelques cas pour le Co [117], le Zn [122], le Cd et le Pb [123]. La principale hypothèse d'un modèle TBLM est que le métal dans le sol est en équilibre avec le métal dans la solution de sol et que la toxicité est liée aux ions libres dans la solution du sol qui se fixent sur un ligand [112, 123]. Comme les modèles BLM, les modèles TBLM prennent en compte la compétition entre les cations qui pourrait réduire la toxicité métallique [112, 123]. Thakali a développé le concept de TBLM pour le Cu et le Ni pour les racines d'orge pour plusieurs types de sols [113]; pour la tomate *Lycopersicon esculentum*, pour le ver *Eisenia fetida*, pour le collembore *Folsomia candida* et pour les microbes du sol [119]. Cette approche est très intéressante pour obtenir des données écotoxicologiques ( $EC_{50}$ ) qui prennent en compte la physicochimie des sols [112]. En effet, les auteurs qui ont dérivés des  $EC_{50}$  à partir de modèles TBLM ont observé un écart entre les valeurs modélisées et des valeurs expérimentales inférieur à un facteur 2 [112, 123].

L'approche par modèles BLM et TBLM commence à être intégrée en ACV pour l'écotoxicité aquatique d'eau douce [16] et l'écotoxicité terrestre [19]. Ligthart *et al.* ont également utilisé des modèles BLM pour obtenir des nouveaux FCs pour le Zn dans la méthode ACV CML2000, mais sans tenir compte de l'influence des types de sols sur la spéciation lorsqu'ils ont déterminé la biodisponibilité du Zn [124]

Cette approche, quoique très intéressante, demeure très limitée pour être appliquée à l'ACV, surtout pour l'écotoxicité terrestre. En effet, chaque modèle BLM ou TBLM étant propre

à un organisme vivant, il faudrait, pour chaque métal, au moins trois modèles TBLM couvrant trois phyla différents. Or ceci est seulement possible pour le Cu et le Ni.

Contrairement aux travaux réalisés pour l'écotoxicité aquatique (voir section 1.5.1), Owsianiak *et al.* ont employé des régressions empiriques pour déterminer les coefficients de partition ( $K_d$ ) et la fraction biodisponible nécessaire pour intégrer la spéciation dans les FC [19]. Ces relations empiriques sont en fait des régressions linéaires multiples obtenues en reliant une certaine concentration de métaux (ex. la concentration d'ion libre ou la concentration de métal soluble) dans les sols aux propriétés des sols correspondantes (ex. concentration totale du métal, pH du sol, contenu en MO) [20, 21, 125-128]. Certains auteurs ont obtenu ce type de régressions en utilisant un large éventail de sols ayant des propriétés très différentes [21, 125]. Groenenberg *et al.* ont d'ailleurs comparé les deux approches, soit l'utilisation d'un modèle de spéciation et l'approche par régressions empiriques, et ont conclu que bien que les régressions empiriques peuvent fournir des prédictions assez robustes pour la spéciation de la plupart des cations, elles sont néanmoins dépendantes du choix et du nombre de propriétés de sols inclus dans les relations [20, 21]. Pour cette raison, cette approche est généralement applicable seulement aux sols utilisés pour dériver ces régressions linéaires multiples, ce qui limite leur généralisation [20, 21].

## CHAPITRE 2 PROBLÉMATIQUE, HYPOTHÈSE DE RECHERCHE, OBJECTIFS ET MÉTHODOLOGIE

### 2.1 Problématique

À la lueur de ces connaissances, on constate qu'il y a un problème majeur au niveau de la prise en compte des métaux dans l'évaluation des impacts écotoxicologiques en ACV. En effet, à cause de l'utilisation de modèles développés pour les composés organiques et inappropriés pour les spécificités des métaux, les métaux dominent souvent les résultats des ACV et risquent d'être écartés à tort des analyses [8, 9].

Or ce problème peut avoir des conséquences importantes sur les décisions environnementales, notamment chez les grands émetteurs de métaux, étant donné que l'ACV est non seulement une méthode de plus en plus reconnue et utilisée dans les entreprises de part le monde [129] mais est également soutenue par le PNUE et intégré dans les directives environnementales européennes [130] et les politiques québécoise de gestion environnementale [131].

Il devient impératif de combler ces lacunes, reconnues notamment par deux récents groupes de travail du PNUE et de la SETAC [12, 13].

Suite à ces groupes de travail, des avancées considérables ont été effectuées pour intégrer la spéciation de 14 métaux en ACV en écotoxicité aquatique d'eau douce [14-18], mais l'intégration de la spéciation en écotoxicité terrestre en est à ses balbutiements. En effet, seule une étude a permis d'obtenir des FC pour l'écotoxicité terrestre et uniquement pour Cu et Ni [19].

Respectant le cadre méthodologique adopté par le consensus de Clearwater [13], les récentes avancées s'accordent pour intégrer au moins un FB dans la définition du FC. Cependant, deux approches ont été avancées pour obtenir ce facteur : l'utilisation d'un modèle géochimique de spéciation [13-17] et l'utilisation de régressions empiriques [19].

Bien qu'étant très intéressantes, ces deux approches ont toutefois des limites. Les modèles de spéciation étant développés pour le milieu aquatique et nécessitant des informations précises sur les conditions physicochimiques du milieu peuvent être difficiles à appliquer pour les sols et à grande échelle. En effet, Groenenberg *et al.* ont noté que les modèles de spéciation permettaient



d'obtenir des résultats satisfaisants pour une vaste gamme de conditions de sols, mais que les résultats dépendaient du paramétrage du modèle [20]. Par contre, les modèles permettent la modélisation de la spéciation pour de nombreux métaux, par exemple 19 métaux pour le modèle WHAM 6.0 [132]. Ceci permettrait d'obtenir une approche cohérente pour la plupart des métaux les plus communs, ce qui est intéressant dans une méthode comme l'ACV. Les régressions empiriques quant à elles ne sont pas nécessairement facilement transposables en dehors du champ d'étude. Néanmoins, Groenenberg *et al.* ont trouvé que les deux méthodes sont équivalentes pour la plupart des types de sols, mais ils soulignent tout de même que des recherches sont requises, notamment pour quantifier les incertitudes associées [20].

Les récents développements s'entendent sur la nécessité d'intégrer la spéciation également au niveau du FE. L'idée d'utiliser des modèles BLM et TBLM est intéressante, mais pour l'instant, elle demeure assez limitée. Il est donc nécessaire d'évaluer d'autres alternatives couvrant trois phyla pour les métaux qui ne disposent pas de modèles TBLM.

Finalement, pour prendre en compte la variabilité spatiale, le consensus de Clearwater préconise l'approche par archétypes. C'est d'ailleurs l'approche qui a été retenue en écotoxicité aquatique [13-17]. Cependant, cette approche n'a pas encore été testée pour les sols. Ces derniers, étant très hétérogènes et ayant des propriétés dont l'influence est corrélée, peuvent compliquer la création d'archétypes. Bien que Dong *et al.* semblent indiquer que pour certains métaux la prise en compte de la variabilité spatiale n'est pas aussi cruciale [17], il est nécessaire de vérifier si ces conclusions s'appliquent également aux sols.

## 2.2 Hypothèse de recherche

L'intégration de la spéciation du Zn dans la définition du FC pour l'écotoxicité terrestre permet de départager deux scénarios pour lesquels le Zn est parmi les principaux contributeurs aux impacts écotoxiques et qui ne sont pas différenciables avec les modèles actuels utilisés en ACV (qui n'intègrent pas la spéciation), l'inclusion de la spéciation se faisant par l'intégration d'un FB calculé avec un modèle de spéciation et par la création d'archétypes de sols.

## 2.3 Objectifs

### 2.3.1 Objectif général

Générer des nouveaux FC régionalisés pour Zn qui tiennent compte de la spéciation pour l'écotoxicité terrestre.

### 2.3.2 Objectifs spécifiques

Le projet vise à remplir les objectifs spécifiques ci-dessous :

- Calculer la fraction biodisponible de Zn dans les sols à l'échelle globale en utilisant uniquement les propriétés des sols présentes dans les bases de données mondiales sur les sols
- Calculer des FC régionalisés pour le Zn qui illustrent à la fois la variabilité spatiale de la biodisponibilité du Zn et qui peuvent être directement intégrés aux méthodes ACV
- Tester l'importance d'intégrer la spéciation du Zn en écotoxicité terrestre en ACV en réalisant une étude de cas.

## 2.4 Choix du métal : le Zn

Étant donné que chaque métal a ses propres particularités concernant la spéciation, il n'est pas possible de considérer directement toutes ces spécificités et de créer un modèle général s'appliquant sans ajustement à tous les métaux. Cependant, il peut être possible de suivre une démarche de modélisation similaire.

Dans ce projet, le Zn a été choisi pour plusieurs raisons. Faiblement répandu dans la croûte terrestre, le Zn fait partie de ce qu'on appelle les métaux trace [70]. Bien que le Zn soit un élément essentiel, il peut entraîner des effets toxiques lorsqu'il se retrouve dans l'environnement. En effet, sous des conditions acides, le Zn libre est un des cations traces divalents les plus solubles et les plus mobiles et donc souvent l'un des plus phytotoxiques après Al et Mn libres [52, 71, 80, 81]. Le Zn est un métal utilisé dans de nombreuses industries, principalement comme revêtement protecteur contre la corrosion. Il est utilisé comme catalyseur dans différents procédés

chimiques (ex. caoutchouc, pigments, plastiques, lubrifiants et pesticides). Étant donné sa versatilité, le Zn est utilisé dans des batteries, des équipements automobiles, etc. certains composés de Zn ont même des applications dentaires et médicales [70]. Ainsi, il est important de mieux évaluer ses impacts écotoxicologiques.

Par ailleurs, les travaux de Lautier *et al.* (2010) révèlent qu'en utilisant les modèles d'ACVI conventionnels, pour lesquels la modélisation des métaux est discutable, le Zn est un des principaux contributeurs de l'empreinte écologique du Canadien moyen principalement en ce qui a trait à l'écotoxicité terrestre [133]. Par ailleurs, Pizzol *et al.* (2011) ont également souligné que la contribution du Zn à l'écotoxicité était très variable selon les méthodes ACV choisies [9]. Étudier davantage le cas du Zn devient donc crucial pour déterminer sa contribution réelle.

De plus, le Zn a fait l'objet de nombreuses études et son comportement dans l'environnement est assez bien documenté [63, 72, 74-76, 111, 134-145]. De plus, des données sur sa spéciation dans les sols ont été publiées, ce qui permet d'obtenir une plus grande quantité de données de terrain pour valider l'approche.

## 2.5 Méthodologie générale

Ce projet est divisé en trois parties répondant chacune à un des objectifs spécifiques et ayant mené à la rédaction d'un manuscrit.

La première étape (chapitre 3) visait à déterminer la biodisponibilité du Zn à grande échelle en utilisant un modèle géochimique de spéciation et des données sur les propriétés des sols disponibles à l'échelle mondiale. Suite à la sélection d'un modèle géochimique, il a été nécessaire de vérifier son applicabilité dans ce contexte précis. Ceci a nécessité une collecte de données de terrain sur la spéciation de Zn dans les sols afin de confronter les résultats obtenus par la modélisation avec des échantillons de terrain. L'utilisation de régressions empiriques a également été confrontée à ces échantillons de terrain afin de comparer les deux approches. Des archétypes de sols ont été créés afin d'évaluer l'étendue de l'applicabilité de la méthode, en faisant correspondre les échantillons de terrain aux archétypes de mêmes propriétés. Finalement, la méthode a été étendue à l'ensemble des sols du monde en utilisant des données sur les sols provenant d'une base de données mondiale.

La deuxième étape (chapitre 4) visait à intégrer cette fraction biodisponible dans la définition du FC afin d'obtenir des FC régionalisés pour l'écotoxicité terrestre pour le Zn qui intègrent la spéciation du Zn. Cette étape a nécessité l'obtention de FD régionalisés et le calcul de FE incluant la spéciation.

Finalement, la troisième étape (chapitre 5) visait à tester ces nouveaux FC obtenus dans une étude de cas où le Zn émis dans les sols est un des principaux contributeurs pour l'écotoxicité terrestre afin de mesurer l'importance d'intégrer la spéciation du Zn en ACV.

La méthodologie générale est présentée à la figure 2.1.

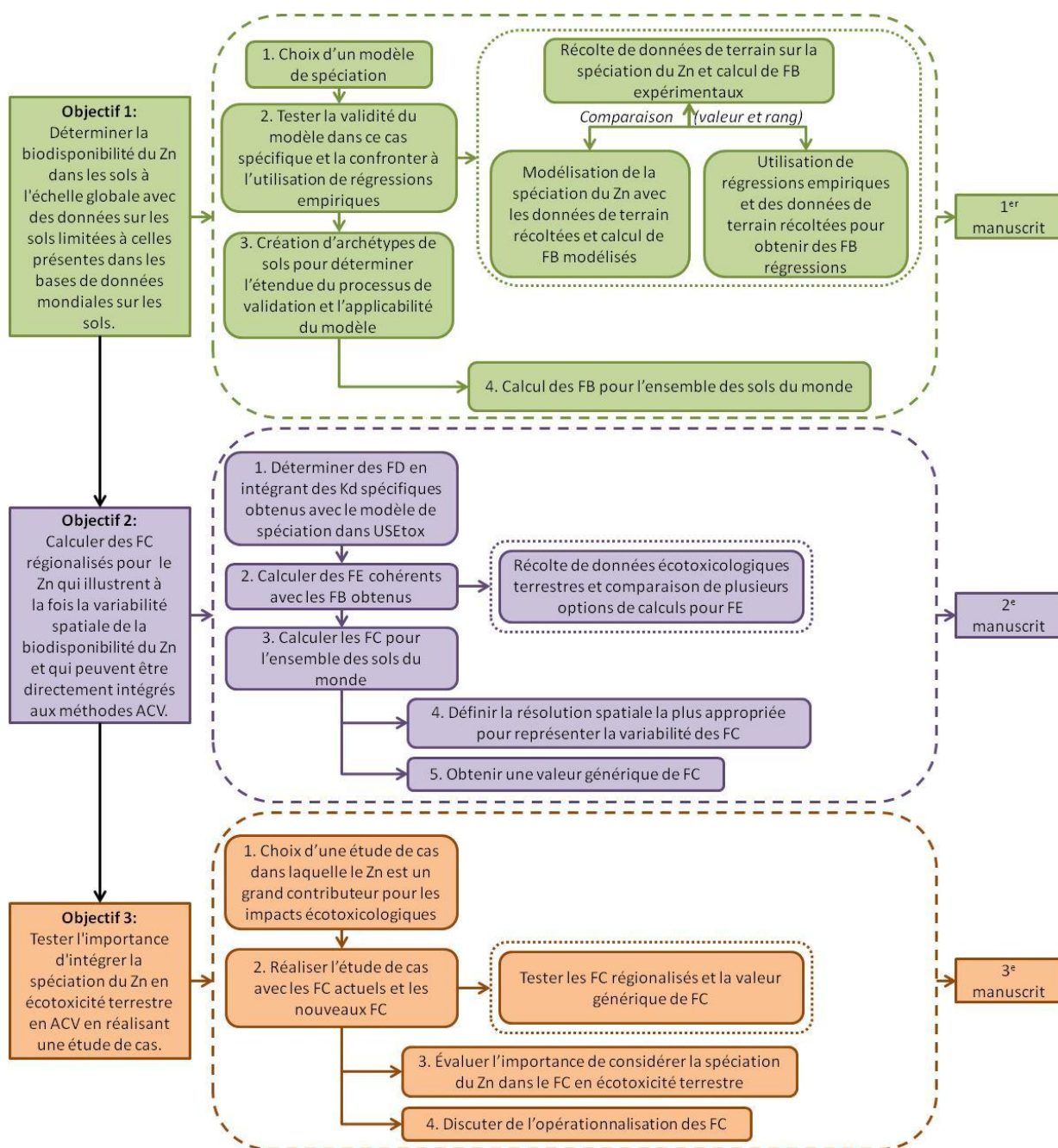


Figure 2.1 Méthodologie générale pour ce projet

## **CHAPITRE 3    PREMIER MANUSCRIT: ASSESSING THE VARIABILITY OF THE BIOAVAILABLE FRACTION OF ZINC AT THE GLOBAL SCALE USING GEOCHEMICAL MODELING AND SOIL ARCHETYPES [1]**

### **3.1 Présentation du premier manuscrit**

Dans ce premier manuscrit, la fraction biodisponible du Zn est déterminée pour l'ensemble des sols du monde en utilisant le modèle géochimique de spéciation WHAM 6.0 et la base de données HWSD (Harmonized world soil database) sur les sols du monde. Pour ce faire, l'applicabilité du modèle WHAM 6.0 pour les sols en utilisant uniquement les propriétés des sols du monde disponibles à l'échelle globale, à savoir, le pH du sol, la CEC, le contenu en MO et en carbonates et la texture du sol, a été validée avec des données de terrain. L'approche a également été comparée à l'utilisation de régressions empiriques, comme suggéré par Owsianiak *et al.* (2013).

### **3.2 Abstract**

#### **3.2.1 Purpose**

Total metal-based toxicity potentials, like the ones used in life cycle assessment (LCA), can sometimes introduce bias and significantly affect the validity of LCA results since toxicity is associated with the bioavailable metal fraction.

#### **3.2.2 Methods**

Here, the bioavailable fraction of zinc (Zn) for world soil types is obtained using the WHAM 6.0 geochemical speciation model. Prior to this, the usability of the WHAM 6.0 model for soils using only globally available soil properties (soil texture, pH, cation exchange capacity, carbonate and organic matter content) was validated with experimental soil data and compared to the use of empirical regressions.

### 3.2.3 Results and discussion

The results confirm that WHAM 6.0 can predict Zn bioavailable fraction with an uncertainty of less than two orders of magnitude—41% being of the same order of magnitude—for a wide variety of soils relative to field data, yielding estimates that are better than empirical regression results in terms of rank and value. World BFs for Zn span over 6 to 18 orders of magnitude for soluble and true solution Zn, respectively, thus confirming the importance of considering spatial variability. In total, 231 soil archetypes are defined based on the soil properties that influence speciation.

### 3.2.4 Conclusions

When compared to experimental values, soluble Zn obtained with WHAM 6.0 seems to constitute a more reliable indicator of the bioavailable fraction of Zn than true solution Zn. Estimates obtained with the WHAM 6.0 model for soluble Zn were closer to field data in terms of value and rank as compared to estimates obtained with empirical regressions. Refining is required to obtain true solution Zn in organic soils. Although not exhaustive, the validation process covers a considerable proportion of world soils, therefore indicating that the method is promising to study Zn bioavailability at the global scale.

### 3.2.5 Keywords

Bioavailability; Life cycle impact assessment; metal speciation; modeling; terrestrial ecotoxicity; zinc.

## 3.3 Introduction

The ecotoxicological impacts of metals are difficult to evaluate because their toxicity depends on speciation, which is related to highly variable environmental physicochemical parameters [6]. Omitting metal bioavailability and the spatial variability of soil properties could overestimate or underestimate the ecotoxicological impacts [6]. In life cycle assessment (LCA), metals tend to dominate ecotoxicological impacts, mainly because characterization factors (CFs) either do not account for metal speciation [41, 46] or are developed for free metal ion [44] and are applied to other metal species (particulate, aqueous, etc.). For this reason, metals tend to be excluded from LCA conclusions, thus raising a credibility issue [9].

Including speciation in a global approach, such as LCA, is not straightforward since speciation is linked to parameters with high geographical variability and missing information, such as location and soil type. In the last decade, two workgroups of the United Nations Environmental Program (UNEP) and Society of Environmental Toxicology and Chemistry (SETAC) life cycle initiative reached a consensus and suggested a framework to include metal speciation in the definition of CFs for freshwater by incorporating a bioavailability factor (BF) that represents the bioavailable fraction obtained with a geochemical speciation model and by taking into account the spatial variability of the physicochemical parameters influencing speciation with the creation of freshwater archetypes of the same properties [12, 13, 146]. The use of archetypes is important in LCA when the emission sources are unknown. In fact, using archetypes makes it possible to obtain default values and corresponding variability ranges (minimum and maximum values for each archetype) that are more representative of the variability of the influent parameters on the CFs—in this case, the freshwater properties that affect metal speciation [13]. The authors suggest defining BFs as the ratio of true solution metal concentration (free ions and ions pairs) and the total metal concentration in the studied environmental compartment, assuming that the true solution metal concentration represents the metal bioavailable fraction, and using the commonly used WHAM 6.0 model because it takes into account the complexity of organic matter (OM) [13]. This is coherent with the fact that plants generally absorb Zn in its free ion form, although ZnOH is also important for adsorption and absorption by plants [58, 78].

Following these recommendations, new freshwater ecotoxicity CFs that consider speciation were obtained for six metals: nickel (Ni), copper (Cu), zinc (Zn), cobalt (Co), cadmium (Cd), and lead (Pb) for seven freshwater archetypes, with bioavailable metal fraction determined with the WHAM 6.0 chemical speciation model [14]. Archetypes were defined according to the variability of three freshwater properties that influence metal speciation (pH, DOC, and water hardness) and each archetype groups of all freshwaters with the same combination of properties (e.g., archetype 1 grouped all freshwaters with high pH and water hardness and medium DOC values) [14]. New CFs were tested in two study cases: a Zn gutter system and a Cu pipe system. The results indicate that including metal speciation led to significant differences in terms of the contribution of each metal to the total score (sum of CFs  $\times$  emissions) and values of the total metal freshwater ecotoxicity scores attributable to metal



emissions, which were lower by 1 to 4 orders of magnitude [16]. The approach was extended and standardized to 14 cationic metals (Al(III), Ba, Be, Cd, Co, Cr(III), Cs, Cu(II), Fe(II), Fe(III), Mn(II), Ni, Pb, Sr, and Zn) using the same seven freshwater archetypes [17]. The authors showed that for metals such as Cd, Mn, Ni, and Zn, which are less pH dependent and have high partition coefficients (with DOC and particles), the spatial differences are not as important since new CFs only vary between 0.7 and 0.9 orders of magnitude, and when compared to current CFs, most newly calculated CFs are similar or higher and fall within the same 2 orders of magnitude [17].

Recently, another approach was tested to obtain terrestrial ecotoxicity CFs for Cu and Ni [19]. Owsianiak et al. calculated CFs for 760 different soils by introducing bioavailability and accessibility factors computed with empirical regressions. A CF spatial variability of 3 and 3.5 orders of magnitude was observed for Cu and Ni, respectively (2 orders of magnitude for a 95 % confidence interval) [19].

Although the results for freshwater ecotoxicity are more mitigated, these latter developments [14-17, 19] suggest that including speciation and the spatial variability of environmental properties in CF calculation could have an incidence on the results in global approaches such as LCA.

Although quite interesting, the UNEP/SETAC consensus approach [13] adopted for freshwater ecotoxicity [14-17] could be difficult to apply to soils because of the use of a geochemical speciation model. While there is a wide array of speciation models and software (e.g., MINEQL+, MINTEQA2, GEOCHEM, WATSPEC, WATEQ, PHREEQ, ECOSAT, ORCHESTRA, WASP, WHAM, and NICA-Donnan) [6, 22, 49, 51, 63, 94-97], only two models enable the simulation of metals and organic ligands: Windermere humic aqueous model (WHAM) and nonideal competitive adsorption Donnan model (NICA-Donnan) [22]. These models are equilibrium models adapted to the heterogeneity of organic matter [66, 102-104]. WHAM 6.0 also makes it possible to model metal complexation reactions with inorganic ligands. Another problem with the geochemical speciation models is that they do not consider the kinetics of precipitation and dissolution [23, 63]. Generally, a kinetic approach better represents natural environments since the reactions involving metals in soils do not all occur in a sufficiently short timeline to enable modeling in equilibrium conditions [57]. In fact, the kinetics of certain metal dissolution reactions are so slow that they are practically impossible as compared to other

reactions involving metals [37]. Using an equilibrium approach puts all these reactions at the same level by assuming that they all occur instantly. However, the use of kinetics requires data that are not available, especially with regard to kinetics related to reactions with organic matter [22, 57, 63, 147]. In a global approach, such as LCA, integrating a kinetic component would also mean integrating kinetics in emissions and fate, which, along with the complexity of regionalization, would lead to gigantic equation systems and disproportionately complicated data storage and calculations [58].

Nonetheless, the models are applied to soils, generally using soil solution characteristics as input values [78, 102, 104, 107, 109-114, 148]. However, there is no consensus on which model and parameterization are best suited to soils. In fact, certain studies reveal good model predictions for cation speciation [72, 102], whereas others resulted in inadequate predictions [107, 111]. Also, global scale soil solution data are not available, raising the question of whether geochemical speciation models can be used for soils when specific soil solution data are missing. Moreover, since soils are more heterogeneous than water, regionalization and archetype determination—especially the selection of influent soil properties—are more complex.

Alternatively, Owsianiak et al. used empirical regressions instead of speciation models to determine bioavailable fractions through multiple linear regressions performed on field data relating metal speciation (soluble metal concentration or free ion activity) to soil properties (total metal burden, soil pH, and soil organic matter (OM) content) [20, 125-128, 149]. Some authors found that these types of regressions could be applied to a wide range of soil conditions [21, 125]. When comparing the two approaches, Groenenberg et al. concluded that, although empirical regressions can be robust speciation predictors for most cations, they depend on the choice and number of soil properties used and are generally applicable only to the soils that were used to obtain them [20, 21]. Groenenberg et al. showed that models yield satisfactory results for a wide range of conditions and are better predictors of extreme conditions, but the results may vary according to model setup and parameterization [20]. Even so, Groenenberg et al. found that the two methods are equivalent for most soil types and affirmed that further research is required to quantify model uncertainty when the models are used generically [20]. Also, the use of empirical regressions implies deriving BFs in terms of soluble, free metal ions, or exchangeable metal concentrations, which are not in line with the Clearwater Consensus recommendation to use true solution metal concentration.

The main goal of this project was to determine the bioavailability of Zn in soil at the global scale using a geochemical speciation model with limited soil data (only those available in world soil databases) and soil archetypes in order to facilitate its integration into a global method such as LCA and its generalization to other metals. The first step was to see whether current models can be used since they could represent a quick solution to a significant issue in LCA. The WHAM 6.0 model was selected for this project for several reasons: It is part of the Clearwater recommendations and is commonly used to determine speciation in freshwater and soil solutions [13], it models reactions with OM content and other important metal ligands in soils, and makes it possible to quantitatively input particulate matter, making it simpler to use beyond its standard framework.

To test the validity of WHAM 6.0 in this specific case, a literature review was carried out to collect field data on Zn speciation in soils and the corresponding soil properties. BFs were calculated with the collected field data. The speciation of Zn in soils using the same field data was modeled using WHAM 6.0, and a second series of BFs was calculated with these results. These two series of BFs were compared to quantify the differences between field and modeled data in terms of values and ranking. A third series of BFs was obtained with the same field data using empirical regressions in order to compare the use of WHAM 6.0 and empirical regressions. In this regard, the applicability of empirical regressions derived by Groenenberg et al. (2012) to predict soluble concentration for a set of soils that fall in the same range as the one used to obtain the regressions (results are shown in the Electronic Supplementary Material ) was tested. Soil archetypes were created to determine the extent of the validation process and applicability of WHAM 6.0 at the global scale by matching field data validation results and the corresponding soil archetype. Archetypes will also be useful to determine generic values when BFs are ultimately integrated into the determination of CFs. The Zn bioavailable fraction was then calculated for each world soil type using a detailed world soil database. Zinc was chosen because it is one of the main contributors to the Canadian ecological footprint for terrestrial ecotoxicity [133]. It is therefore crucial to study Zn to determine its true contribution.

## 3.4 Methods

### 3.4.1 Nomenclature

The following Zn fractions used in this study are illustrated in Figure 3.1 and described below.

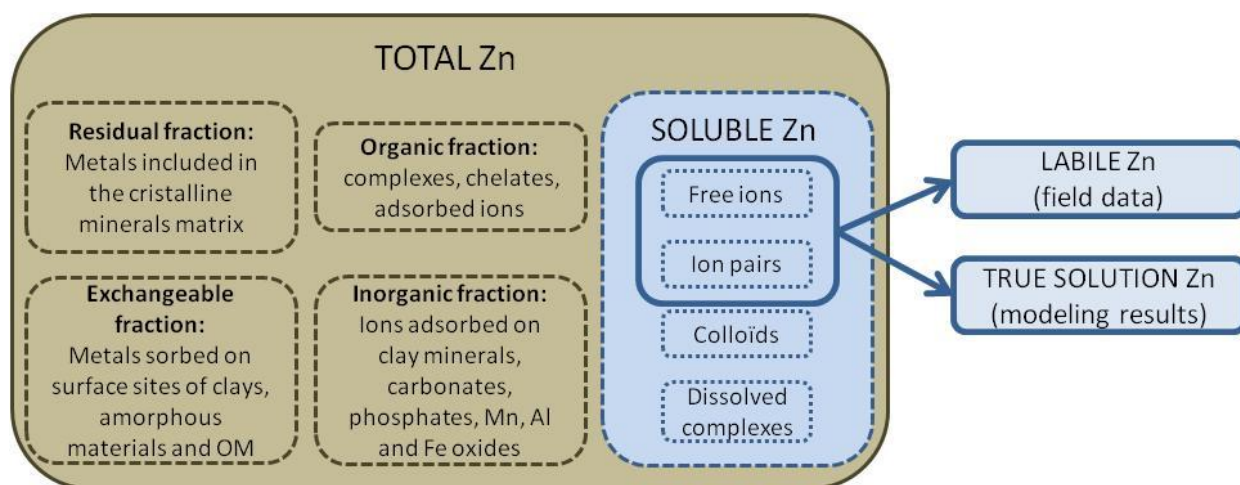


Figure 3.1 Description of zinc fractions used in this study

In this figure, total Zn represents total Zn concentration in soil as obtained analytically by using an acid digestion method, except cold or dilute acid extractions [23]. In addition to the elemental form of the metal, it includes at least all the fractions defined here. Part of total Zn, soluble Zn stands for total soluble Zn (free ion, ion pairs, and complexes) concentration in soil obtained by extracting soil solution by water or neutral salt extractions, lysimeter, water displacement, centrifugation, or rhizon moisture samplers [23]. Part of soluble Zn, labile Zn includes free metal and metal ion pairs that can dissociate rapidly in soils. This definition of labile Zn was chosen because it is the experimentally obtained Zn fraction that is the closest to true solution Zn [150]. In fact, labile Zn concentrations in soil are obtained by mixing soil samples (1:4 soil/solvent ratio) for 2 h, filtering the supernatant of the soil slurry, adjusting the concentration with KNO<sub>3</sub>, and measuring the concentration with square wave anodic stripping voltammetry [151, 152]. The labile Zn considered here does not include DTPA, EDTA, or acetic acid extracted Zn since they are much stronger ligands and represent a much higher metal fraction than true solution. The true solution Zn needed to calculate the BF is defined by free Zn ions and

ion pairs in soil solution, as modeled by a geochemical model. It is analogous to labile Zn but is obtained in a different way (geochemical modeling vs. field data measurements).

### 3.4.2 Use of WHAM 6.0 to obtain Zn bioavailable fraction in soils

#### 3.4.2.1 BF calculation from literature field data

The first step of this study was to test the use of WHAM 6.0 when only limited soil data are available. A literature review for Zn soil speciation was therefore conducted in order to compare WHAM 6.0 speciation results and experimental speciation data. In total, 40 soils previously sampled around galvanized Zn structures [151] and 248 additional field samples from 18 published studies were listed [63, 72, 74-76, 111, 134-145]. The samples provided measurements of soil properties (pH, cation exchange capacity (CEC), texture, OM and carbonate contents), total Zn and soluble (278) or labile (36) Zn. The soil data that were gathered cover a wide variety of soil properties for the broadest possible validation. A description of the experimental data is available in the Electronic Supplementary Material (annexe A). For each soil sample, an experimental BF ( $BF_{exp}$ ) was calculated using total Zn and soluble or labile Zn.

To ensure coherence with work on freshwater ecotoxicity, it was considered that the bioavailability factor (BF) was given by the ratio of bioavailable Zn ( $[Zn]_{bioavailable}$ ) to total Zn ( $[Zn]_{total}$ ) (Eq. 1) [13, 14, 16] :

Équation 1 BF definition [13, 14, 16]

$$BF = \frac{[Zn]_{bioavailable}}{[Zn]_{total}}$$

According to available Zn speciation field data, experimental BFs were calculated using soluble and labile Zn to represent the bioavailable fraction of Zn. These BFs are used throughout the study to validate the use of WHAM 6.0 and empirical regressions. Labile Zn was chosen because it is the closest fraction for which field data were available to the bioavailable Zn fraction as defined in the Clearwater Consensus [13]. Soluble Zn fraction was chosen because it generally includes most of Zn bioavailable fraction and more field data are available.

In order to obtain dimensionless BFs (mg/L soil)/(mg/L soil), soil density and available water capacity were used to transform concentrations into the proper units (see Electronic Supplementary Material for details, annexe A).

### **3.4.2.2 BF calculation with WHAM 6.0**

The WHAM 6.0 model was initially developed to model chemical equilibria in oxic waters [132]. It contains sub-models that represent ion binding on humic substances (Humic Ion Binding Model VI) [153] and mineral solids (SCAMP submodel) [154]. The latter sub-model contains a surface complexation model to four surface types—silica, iron, manganese and aluminum oxides—and a cation-exchange model for clays [132, 154]. While it does not consider precipitation, WHAM 6.0 was chosen for its coherence with LCA-derived freshwater ecotoxicological CFs [14, 15]. The model is also frequently used in soil metal speciation studies and includes data on 19 other common metals, thus facilitating its generalization [78, 102, 104, 107-114], and makes it possible to enter particulate phases quantitatively as input parameters, thus facilitating its adaptation to soils.

WHAM 6.0 is only applied to field data listing all soil properties (28 for labile Zn and 78 for soluble Zn, see details in the Electronic Supplementary Material, annexe A) to ensure that divergences are not due to missing data. An exception was made for four peat soils for which texture is not listed to determine whether these extreme soils can also be modeled. However, the results for these samples must be interpreted carefully since their modeling is based on incomplete data.

The objective was to obtain bioavailable Zn fractions at the global scale with limited input data in order to integrate the approach into a global assessment method such as LCA. In this case, global coherence was preferred over precision. For this reason, various assumptions were made to convert soil properties to fit WHAM 6.0 input parameter requirements. Some may seem quite rough to soil scientists but the study should be viewed as a first attempt to use a geochemical speciation model for this purpose. This will make it possible to compare and highlight the eventual need to improve the assumptions (or not).

WHAM 6.0 was used with default parameters as if soil was oxic water with a high level of particulate phases (particulate oxides, silica, quartz, clay and organic matter). Using an oxic model for anoxic conditions could increase the uncertainty since variations in the redox

conditions can influence Zn speciation (Bostick et al. 2001). Nonetheless, although soils can be under anoxic conditions, the method was chosen as a first estimate. Also, since LCA models do not consider a very large soil depth (10 cm for USEtox), it seems reasonable to consider oxic conditions.

Particulate silica, quartz, clay and iron oxide were obtained using soil texture (% sand, silt and clay); particulate humic and fulvic acids (HA and FA respectively) were used to account for soil OM content; major cations ( $\text{Ca}^{2+}$ ,  $\text{Mg}^{2+}$ ,  $\text{K}^+$ ,  $\text{Na}^+$ ,  $\text{Al}^{3+}$ ) in solution were obtained with CEC and total Zn; and carbonate content ( $\text{CO}_3$ ),  $\text{Cl}^-$  and  $\text{SO}_4^{2-}$  were entered as solution components. The inclusion of estimated dissolved organic carbon (DOC) as colloidal HA and FA was also tested to determine whether it improves the modeling results. The equations used for WHAM 6.0 modeling data preparation are described in the Electronic supplementary material (annexe A).

A second set of BFs was obtained ( $\text{BF}_{\text{WHAM}}$ ), and the values and ranking were compared to values and ranking of  $\text{BF}_{\text{exp}}$ .  $\text{BF}_{\text{WHAM}}$  were first obtained for each experimental sample.

Model predictions were considered valid if a difference of less than two orders of magnitude was observed between experimental and modeling results—the acceptable uncertainty in LCA toxic impact assessment [33, 44]. This uncertainty level is higher than the single order of magnitude uncertainty usually found for speciation models or empirical relations in other studies [21, 127]. However, this work is the first attempt to encompass all soil types, even extreme soils, perhaps creating more bias than in previous, more restricted studies. We are aware that 2 orders of magnitude are the acceptable uncertainty for CF and not BF (i.e., including fate and effect). However, Gandhi et al. and Dong et al. showed that most of the variability of regionalized CFs is attributable to BFs, and the fate and effect factors contribute much less to CF variability [14, 16, 17]. We are also aware that this uncertainty of 2 orders of magnitude can be insufficient if the span is of 5 to 8 orders of magnitude. For this reason, the proportions of soils for which BFs fall in the same order of magnitude, in a 1 order of magnitude range, 2, 3, 4, and up orders of magnitude, were also shown. Not all data points must meet this criterion because WHAM used in this context could work for certain soils and not others.

BF ranking was compared using the Spearman rank correlation coefficient. The Spearman coefficient was used by Fenner et al. (2005) to compare the rankings of long-range transport

potential estimates of persistent organic chemicals [155]. The coefficient was computed with Equation 2 [156]:

Equation 2 Spearman rank correlation coefficient [156]

$$rho = 1 - \frac{6 \sum d_i^2}{n(n^2 - 1)}$$

Equation 2 defines the Spearman rank correlation coefficient [156].

In Equation 2,  $n$  represents the number of samples, and  $d_i$  is the difference between the ranks of the two series ( $rank_{WHAM} - rank_{exp}$ ). The Spearman rank correlation coefficient is a value between -1 and 1. A value close to 0 indicates no correlation between the ranks of the two series. To determine whether the correlation is significant, a lack of correlation between the two series was assumed. The calculated correlation coefficient was then compared to a critical value representing the correlation coefficient that would be obtained randomly. When two series had more than 30 pairs, a  $t$  value could be obtained with Equation 3 and compared to a corresponding critical value in a  $t$ -table [156]:

$$t = \frac{rho\sqrt{n-2}}{\sqrt{(1-rho^2)}}$$

In Equation 3,  $t$  value is calculated to evaluate the significance of the Spearman rank correlation coefficients for samples of over 30 pairs [156]. If the absolute value of the correlation coefficient or the corresponding  $t$  value for numerous samples is higher than the critical value, the correlation is significant. The root mean square error (RMSE) and the coefficient of determination ( $R^2$ ) were also determined.

### 3.4.3 BF calculation with empirical regressions and comparisons

In order to compare the two approaches, a third series of BFs ( $BF_{reg}$ ) was calculated with empirical regressions using the same process as the one used by Owsianiak *et al.*[19]. Dimensionless (mg/L soil / mg/L soil)  $BF_{reg}$  was also obtained using the available water capacity, as was done for  $BF_{exp}$ . The various empirical regressions that were used are presented in the Electronic supplementary material (annexe A). Comparing  $BF_{WHAM}$ ,  $BF_{regressions}$  and  $BF_{exp}$  highlights the advantages of each methodology for the global assessment of Zn bioavailability.



### 3.4.4 Defining Zn bioavailable fraction for all soil types

#### 3.4.4.1 Creating soil archetypes

Soil archetypes were created to determine the extent of the validation and applicability of WHAM 6.0 at the global scale. In fact, they are a way to match field data validation results to analogous world soils, supposing that soils with similar properties will have similar bioavailability factors.

The first step was to determine the most influential properties on Zn speciation. The influence of soil pH is regularly observed in the literature [58, 70-73, 75]. Clay, OM and oxides are also important ligands for Zn [58, 63, 70, 75, 76]. For these reasons, the selected properties include pH, OM and carbonate content, CEC and soil texture (clay and sand fractions). Although oxides are important ligands, they were not considered in the creation of archetypes due to data availability, but were nonetheless included in WHAM 6.0 modeling (see Section 3.4.2.2).

When creating the soil archetypes, the soil properties influencing Zn speciation were used as a basis to establish the different soil archetypes because we thought that it would better represent the spatial variability of Zn bioavailable fraction. Of course, soil orders group soils with at least one common feature and certainly affect the definition of soil properties (e.g. proportion of cations, type of organic matter content) [157]. However, they can group soils with very different properties. For example, according to FAO90 taxonomy groups in HWSD, eutric regosols can have pH values from 4.4 to 8.8 and total organic carbon from 0.04 to 13.32%. Knowing that pH and OM content are very influent parameters for metal speciation, these differences are likely to influence Zn speciation. Even so, a table relating soil taxonomy to the archetypes is available in the Electronic supplementary material (annexe A).

Data for labile and soluble Zn were treated separately. Multiple linear regressions were performed using XLSTAT software [158] with soil samples that contained all soil properties (28 for labile Zn and 78 for soluble Zn). Linear regressions were also performed using the same software for each soil property in order to determine individual influence and include more samples. Soil properties for which  $\text{Pr}>|t| < 0.05$  were considered significantly influent. The results are detailed in the Electronic supplementary material (annexe A).

The classification was based on arbitrary thresholds for each soil property commonly used in literature. Three subgroups for pH (acid, neutral and alkaline soils), CEC, OM and carbonate contents were chosen. Clay and sand contents are accounted for in USDA soil texture classes, and the subgroups are presented in the Electronic supplementary material (annexe A). Every combination of soil properties using this classification that could be linked to at least one experimental soil was kept as an archetype. The list of archetypes that could be created with experimental soil samples is included in the Electronic supplementary material (annexe A).

#### **3.4.4.2 Defining Zn bioavailable fraction for all soil types—extension of archetypes**

The Harmonized World Soil Database (HWSD) version 1.1 [159] was used. It contains data suited to model some 16 000 soil units and provides information on important soil parameters [159]. Selected properties taken from HWSD are soil pH, CEC, soil texture (% of sand, clay and silt), carbonate and OM content. All possible combinations of these soil properties found in HWSD are listed, making it possible to restrict speciation modeling to 5 213 samples instead of 16 000 soil units. HWSD statistics are listed in the Electronic supplementary material (annexe A).

An estimation of Zn background natural concentration was based on a mean value according to soil texture from [70] (see Electronic supplementary material for details on the assumptions, annexe A). Since current emissions do not occur in pristine soils, a previous emission level of 1 g Zn/l of soil, which represents background anthropogenic emission levels between 510 mg/kg and 1176 mg/kg (mean 718 mg/kg) according to bulk density of soil, was also considered. These emission levels fall within the range of anthropogenic emission levels according to [70]. In fact, non ferric smelters and contaminated sites contain between 443 and 1 112 mg/kg of Zn, and the average concentration of Zn in sludge for the EU is around 811 mg/kg. The use of background metal concentration was recommended by the Clearwater Consensus [13], and an average background concentration based on European average metal concentrations in water was applied when developing freshwater BF<sub>s</sub> [14].

HWSD statistics are listed in the Electronic supplementary material (annexe A). For all properties, only topsoil values were considered, assuming that the topsoil is where most of the terrestrial living organisms are located and most soil emissions occur. Also, the approach is only applicable to the vadose zone of soil, and groundwater was not considered in this study.

BFs were calculated using soluble or true solution Zn obtained using the same assumption for WHAM 6.0 as for experimental soil samples for each of the 5 213 soil samples. The soil samples were then grouped into archetypes based on the same classification as the one defined for experimental soil data in order to match experimental data to analogous HWSD soil samples. The model was considered valid for an archetype when WHAM 6.0 predictions were below two orders of magnitude, as compared to experimental data for experimental soil samples comprised in the archetype.

For each archetype, BF minimum, maximum, median and mean values and an indication of WHAM validation were attributed. A BF variability of two orders of magnitude within one archetype was considered acceptable since it corresponds to the acceptable variability between  $BF_{WHAM}$  and  $BF_{exp}$  and uncertainty in toxic impacts in LCA [33, 44]. This acceptable uncertainty must be low enough to distinguish between archetypes. Soil maps showing the extent of the validation and BF spread were obtained to target the needs to further extend WHAM 6.0 parameterization validation and refine the archetype definition, especially in cases in which variability was higher than two orders of magnitude.

## 3.5 Results

### 3.5.1 Zn speciation in soils- field data BFs ( $BF_{exp}$ )

Figure 3.2 presents dimensionless (mg/L soil/mg/Lsoil) labile and soluble Zn  $BF_{exp}$ .

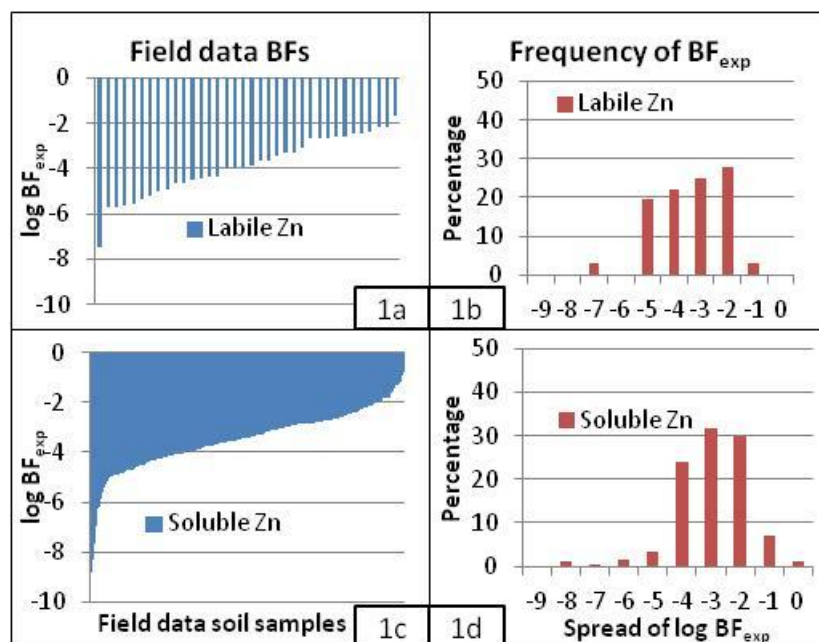


Figure 3.2  $BF_{exp}$  and spread of  $\log BF_{exp}$  for labile (1a and 1b) and soluble (1c and 1d) Zn

According to Figure 3.2,  $BF_{exp}$  span over five orders of magnitude (5.77) for labile Zn ( $2.12E-02$  to  $3.63E-08$ ) and over eight for soluble Zn ( $1.44E-08$  to  $1.68E-01$ ). The span is greater than what was determined for soluble Zn by Gandhi et al. (about 2 orders of magnitude) [14, 15]. Since soils are more heterogeneous environments [23], a larger range for soil BFs, as compared to freshwater BFs, is not surprising. Labile Zn falls in the same range as soluble Zn. It is interesting to note that the span also exceeds the one modeled for Cu and Ni by Owsianiak et al. [19]. This difference could stem from the different speciation patterns between the three metals and the methodological choices made in the two studies.

### 3.5.2 $BF_{WHAM}$ calculation with WHAM 6.0

Figure 3.3 presents soluble and labile Zn  $BF_{WHAM}$  calculated with the 84-16 OM assumption and estimated DOC.

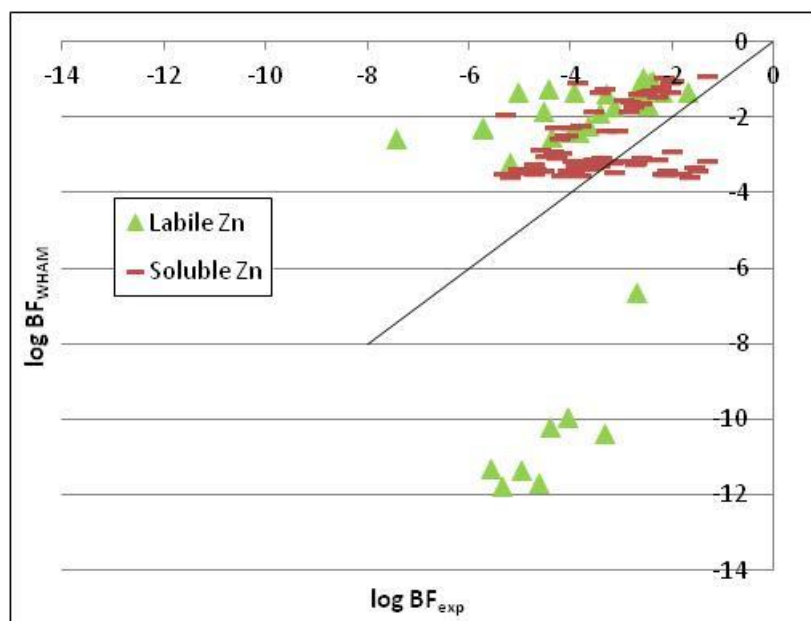


Figure 3.3 Comparison of  $BF_{WHAM}$  and  $BF_{exp}$  for soluble and labile Zn

According to Figure 3, soluble Zn  $BF_{WHAM}$  span over three orders of magnitude ( $1.2E-1$  to  $2.5E-4$ ) and fall in the range of the  $BF_{exp}$  ( $4.94 E-2$  to  $4.92E-6$ ). Using WHAM 6.0 tends to overestimate BF values (64 of 82 samples). For most samples (77 of 82), the difference between  $BF_{WHAM}$  and  $BF_{exp}$  is lower than two orders of magnitude, the highest being 3.35 orders of magnitude. The soluble Zn Spearman rank correlation coefficient is 0.276, indicating a significant correlation between  $BF_{WHAM}$  and  $BF_{exp}$  rankings ( $t$ -value of 2.57 obtained for 80 pairs as compared to a critical  $t$  value of 1.99 for a 95% confidence level) [156]. The labile Zn Spearman rank correlation coefficient is 0,637 ( $t$  value of 4.53 as compared to  $t$  table critical value of 2 for 32 pairs for a 95% confidence level) indicating a significant correlation between  $BF_{WHAM}$  and  $BF_{exp}$  rankings [156].

## 3.6 Discussion

### 3.6.1 $BF_{WHAM}$ calculation with WHAM 6.0

The inclusion of DOC was tested, and the results indicated that the inclusion improves modeling estimates (see results in the Electronic supplementary material, annexe A). Thus, the results are only shown for modeling estimates including DOC.

When looking at soluble Zn, among the 82 samples,  $BF_{WHAM}$  fall in the same order of magnitude as  $BF_{exp}$  for 34 soil samples (41%). For 43 samples (52%), the difference is between 1 and 2 orders of magnitude, and for the remaining 5 (7%), the difference is around 2 orders of magnitude except for two samples for which the differences are 2.79 and 3.35. Considering that  $BF_{exp}$  for soluble Zn span over 8 orders of magnitude, an uncertainty below 2 orders of magnitude would still make it possible to distinguish the major differences between BFs for soluble Zn. For labile Zn, among the 32 samples,  $BF_{WHAM}$  fall in the same order of magnitude as  $BF_{exp}$  for 4 soil samples (12.5%). For 12 samples (37.5%), the difference is between 1 and 2 orders of magnitude; for 3 samples (9%), the difference is between 2 and 3 orders of magnitude; and for the remaining 13 (41%), the difference ranges between 3.18 and 7 orders of magnitude. Considering that  $BF_{exp}$  for labile Zn span over 5 orders of magnitude, the uncertainty below 2 orders of magnitude would still make it possible to differentiate between the lowest and highest BFs. This represents some 50% of soils for labile Zn. For 13 soils, the discrepancies are very high. Among those, 9 are soils with a high OM content (between 8 and 70%) and high CEC (between 29 and 245 cmol/kg), indicating that WHAM 6.0 used in this way may not be appropriate for these types of soils.

The 84-16 OM assumption yielded either the best or an equivalent result for almost all soil archetypes. This assumption and estimated DOC were used to compute worldwide BFs.

Labile Zn measurements are the closest experimental results from true solution Zn modeled by WHAM 6.0. Given the availability of published Zn speciation data, there was generally only one experimental soil sample per archetype, giving a lot of weight to experimental bias. For example, for one soil sample, modifying the pH from 7.2 to 7.6 induced a gap of one order of magnitude in  $BF_{WHAM}$ . Moreover, some approximations used in WHAM 6.0 modeling may not be adequate for all soil types. For this reason, we tested various proportions of cations in CEC and oxide types. For some soils, the results varied over several orders of magnitude, indicating that part of the difference could come from inadequate assumptions. In the tested soils, however, the estimates that were initially selected were the closest to the experimental results.

The results confirm that WHAM 6.0 can be used with limited soil data as input parameters to obtain bioavailable Zn fraction, that the results fall in the same order of magnitude for most soil samples (41%) and that, for the remaining soils, with the exception of two soil

samples, the uncertainty is not higher than 2.07 orders of magnitude, still making it possible to broadly distinguish the bioavailable Zn fractions when using soluble Zn as the bioavailable fraction. Also, the soil ranking according to experimental bioavailable fraction and the ranking proposed using the modeled results are significantly correlated. Although the results obtained with labile Zn in soil solution indicate that WHAM 6.0 could adequately predict true solution Zn as well (for 50% of soil samples the difference was lower than 2 orders of magnitude between the 2 BF series and the ranking of  $BF_{WHAM}$  was significantly correlated to the ranking of  $BF_{exp}$ ), further investigation—especially an increased number of validation samples and a different parameterization—is required to confirm the adequacy of using WHAM 6.0 for true solution Zn with limited soil data. Also, it would be interesting to compare the results with the newer version of WHAM. In fact, WHAM 7.0 provides a newer version of the Humic Ion Binding Model (version 7) [106], which could perhaps help solve the problem of soils with a high OM content.

### 3.6.2 Empirical BF's

Figure 3.4 shows the soluble Zn  $BF_{reg}$  obtained for the soil samples used in WHAM 6.0 modeling. Since no empirical regression that could allow a comparison with labile and true solution Zn was found for Zn, only soluble Zn obtained by regression was compared.

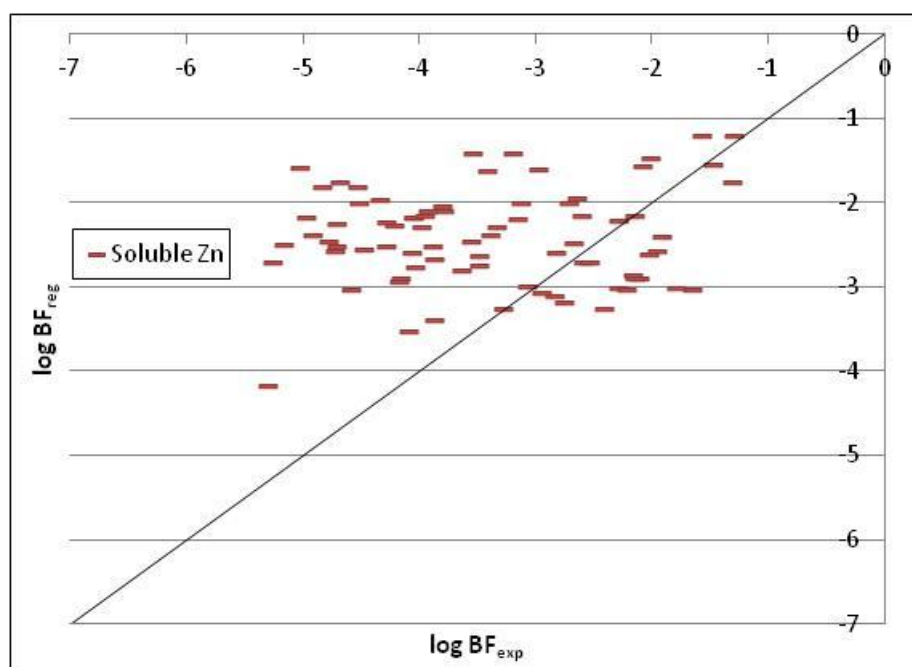


Figure 3.4 Comparison between  $BF_{reg}$  and  $BF_{exp}$  for soluble Zn

According to Figure 3.4, soluble Zn  $BF_{reg}$  span over 2.98 orders of magnitude ( $6.37E-02$  to  $6.74E-5$ ) and fall in the range of  $BF_{exp}$  ( $4.94 E-02$  to  $4.92E-06$ ) obtained for this set of soil samples. As for the use of WHAM 6.0, the use of regressions tends to overestimate BF values (59 of 78 cases). Among the 78 soil samples, 35 (45%) fall in the same order of magnitude as  $BF_{exp}$ . For 27 samples (35%), the difference is between 1 and 2 orders of magnitude; for 14 samples (18%), the difference is between 2 and 3 orders of magnitude and for the remaining 2, the difference is between 3 and 3.44 orders of magnitude (see details in Electronic supplementary material, annexe A). The results are similar to those obtained with WHAM 6.0, though the proportion of soils for which results fall within two orders of magnitude as experimental values is lower when using empirical regression (80% as compared to 93%). Unlike when using WHAM 6.0, the Spearman rank correlation coefficient is very close to 0 (0.05), indicating that experimental value ranking is not respected when using these regressions.

The results confirm that the use of WHAM 6.0 to represent bioavailable Zn fraction defined as soluble Zn seems to provide better estimates than the use of empirical regressions in terms of rank and value, apparently confirming that empirical regressions are not easily applicable outside the range of soils used to obtain them [20] (additional results are included in the Electronic supplementary material, annexe A).

### **3.6.3 Zn bioavailable fraction for worldwide soil type**

Figure 3.5 presents soluble and true solution Zn HWSD  $BF_{WHAM}$ .



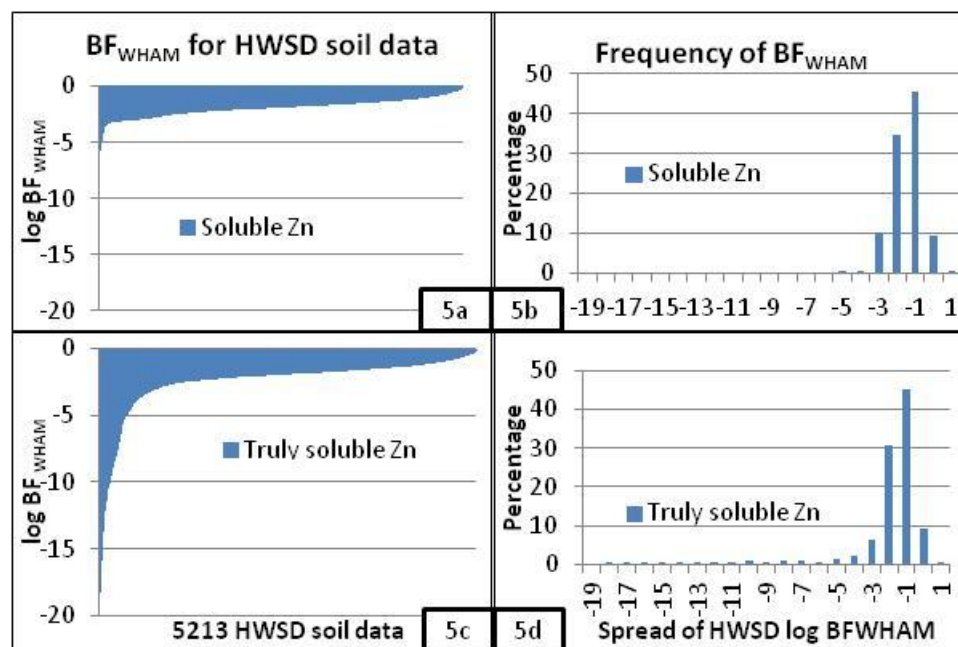


Figure 3.5 HWSD  $BF_{WHAM}$  and spread of  $\log(BF_{WHAM})$  for soluble (5a and 5b) and true solution Zn (5c and 5d)

According to Figure 3.5, HWSD true solution Zn  $BF_{WHAM}$  spread over 18 orders of magnitude (from  $4.62E-19$  to  $8.48E-01$ ), which is much higher than for  $BF_{exp}$ . Almost all BFs (98%) are comprised within the first ten orders of magnitude, and some 85% of BFs are in the range of Gandhi et al. (between 0 and 0.01) [14]. Soluble Zn HWSD  $BF_{WHAM}$  are coherent with  $BF_{exp}$  (a spread between  $1.44E-08$  and  $1.68E-01$ ).

The next step was to match validation results to HWSD soil types in order to show the coverage of the validation. HWSD soil samples were grouped into 231 soil archetypes (listed in the Electronic supplementary material, annexe A), of which 29 were part of the previous empirical validation. As shown in Figure 3.6, these 29 archetypes represent some 25% of the HWSD soil units.

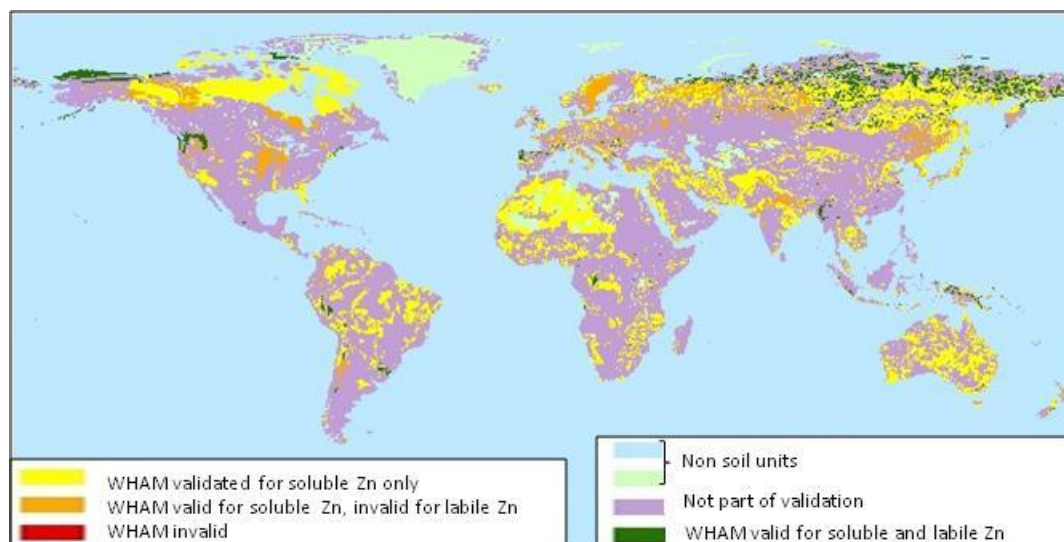


Figure 3.6 Extent of WHAM 6.0 validation for HWSD soil archetypes

The validation process presented above covers approximately 25% of HWSD soil units for soluble Zn and only 2.9% for labile Zn, highlighting the need to further extend the validation process, especially for labile Zn. The soils covered by the validation process (that represent a quarter of the earth's soil-covered surface) and for which the WHAM 6.0 predictions that fall in a range of under two orders of magnitude are found on all continents and cover some high population density zones, which we can assume are likely to receive Zn emissions. This shows that the breadth of the validation process is considerable. For the other 75%, no experimental data was available to confirm the applicability of WHAM 6.0 for these soils. However, that is not to say that WHAM 6.0 is invalid for the 75%, simply that it was not verified with field data. Nonetheless, for at least soluble Zn,  $BF_{WHAM}$  fall in the same range as  $BF_{exp}$ . It can therefore be assumed that WHAM 6.0 could yield satisfactory results for a greater proportion of soils.

The use of WHAM 6.0 seems appropriate, and soluble Zn is not necessarily sufficient to define Zn bioavailable fraction. Future studies should therefore consider two options: one that is more representative of the bioavailable fraction of Zn (true solution Zn) but for which the validation coverage is limited and another validated with more confidence (soluble Zn).

Figure 3.7 illustrates the mean  $BF_{WHAM}$  values allocated for each of the 231 archetypes for true solution and soluble Zn.

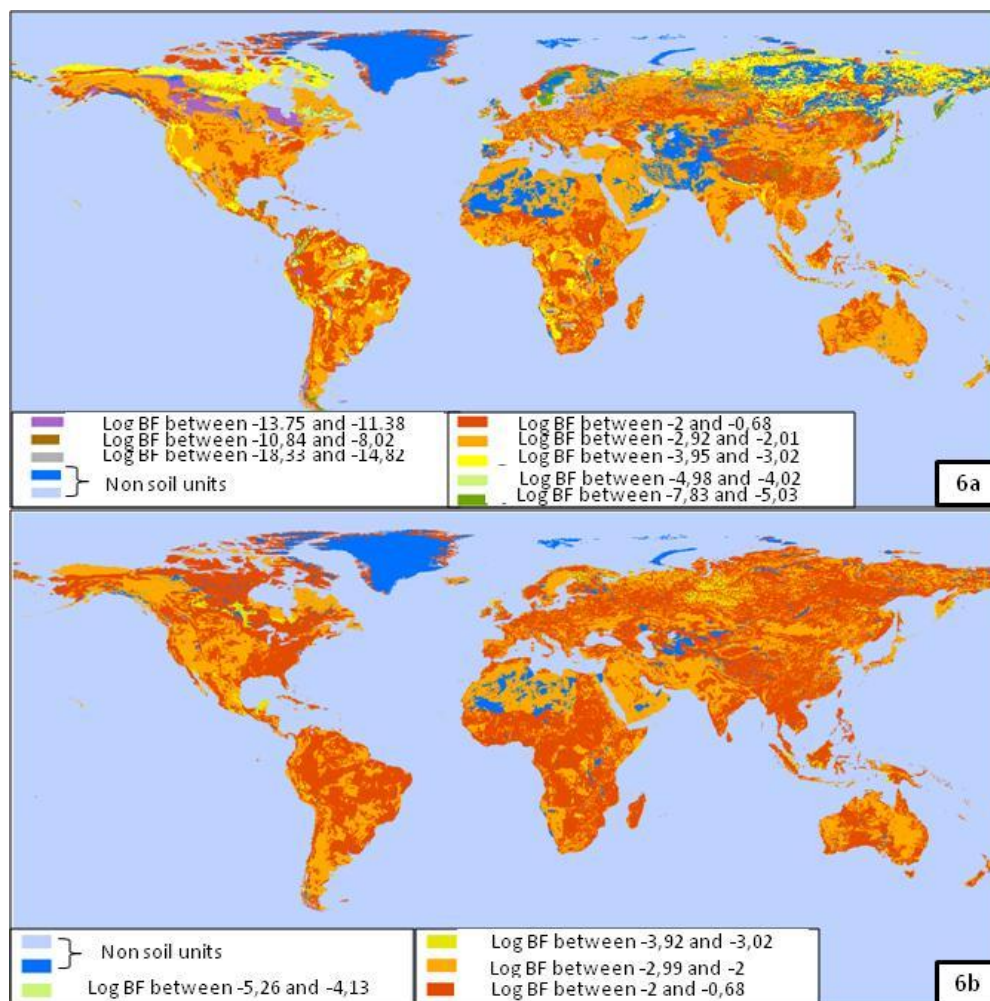


Figure 3.7 Mean  $BF_{WHAM}$  for HWSO soil data for true solution (6a) and soluble (6b) Zn

Looking at the large proportion of mean  $BF_{WHAM}$  values between 0 and  $10^{-4}$ , the number of useful archetype could be reduced. Also, a large proportion of archetypes present variability greater than two orders of magnitude (39.9% for true solution and 27.6% for soluble Zn). However, although refining is needed, mean values per archetype still represent a broad BF span.

### 3.7 Conclusion

The objective of this study was to obtain the bioavailability of Zn in soil at global scale with limited soil data (only those available in world soil databases) to ultimately facilitate its integration into a global method such as LCA and its generalization to other metals. To do so, the method aimed to determine Zn bioavailable fraction with a geochemical speciation model. Since no speciation model has been developed specifically for soils in this context, the usability of

WHAM 6.0 to calculate the Zn bioavailable fraction for world soil types with limited soil input parameters was tested. The results confirm that WHAM can predict Zn bioavailable fractions with an acceptable uncertainty of two orders of magnitude for a large proportion of soils (with predictions of the same order of magnitude for 41% of soils) and that WHAM 6.0 estimates are better than empirical regression results in terms of rank and value. Soluble Zn seems to constitute a more reliable indicator than true solution Zn when compared to experimental results, except for soils with OM content lower than 8%. Zn world BFs span over 6 and 18 orders of magnitude for soluble and true solution Zn, respectively, confirming the importance of considering this variability. The validation work carried out as part of this project is not exhaustive, and there is no certainty that WHAM 6.0 is a good predictor of true solution Zn if it is a good predictor of soluble Zn. However, it remains an important step in validating the use of WHAM 6.0 for soils with limited soil data and global scale impact assessments. The use of soil archetypes, created on the basis of the variability of influent soil properties on Zn speciation, was important to gauge the coverage of the validation process. Soil archetypes could also be an interesting avenue to reduce the required number of BF values to a manageable global scale number. This could constitute a promising approach to derive toxicity potentials in LCA. Prior to this redefinition, it must be determined whether validated soils correspond to soils that are more likely to be contaminated by metals in order to target further needs in speciation modeling and validation and focus efforts where they are truly needed. Also, soil archetype definition must be coherent with toxicity potential variability, which may differ since it also accounts for exposure and effect factors.

## **CHAPITRE 4 DEUXIÈME MANUSCRIT: CHARACTERIZATION FACTORS FOR ZINC TERRESTRIAL ECOTOXICITY INCLUDING SPECIATION**

### **4.1 Lien entre le premier et le deuxième manuscrit**

Le premier manuscrit a permis de déterminer les FB pour le Zn et les bases nécessaires pour définir les archétypes de sols. La prochaine étape, qui fait l'objet du deuxième manuscrit, est d'intégrer ces FB dans le calcul des FC et de définir par la suite le niveau de régionalisation nécessaire pour bien représenter la variabilité spatiale des FC.

### **4.2 Présentation du deuxième manuscrit**

Dans ce deuxième manuscrit, des FC incluant la spéciation sont calculés pour le Zn pour l'écotoxicité terrestre en utilisant les FB obtenus précédemment (voir chapitre 3). Pour ce faire, des FD ont été déterminés à partir du modèle USEtox et de  $K_d$  spécifiques obtenus avec le modèle WHAM 6.0. Ensuite, des FE ont été calculés en utilisant la méthode AMI avec des données écotoxicologiques terrestres ( $EC_{50}$ ) disponibles dans les bases de données écotoxicologiques. Plusieurs scénarios ont été envisagés pour calculer les FE. En effet, l'option de séparer les données en termes de la spéciation et des propriétés des sols utilisés pour les tests écotoxicologiques ont été confrontées au scénario actuellement utilisé en ACV qui consiste à utiliser toutes les données d'effet sans faire aucune distinction. Des archétypes de sols ont été créés en fonction des propriétés des sols qui influencent la spéciation du Zn et qui sont disponibles à grande échelle (voir chapitre 3) afin de mieux représenter la variabilité spatiale des FC obtenus et aussi pour obtenir une résolution spatiale plus facile à gérer pour l'ACV. Une valeur globale de FC pour le monde a été calculée en utilisant la densité de population comme proxy d'émissions de Zn. Les résultats des FC régionalisés sont ensuite présentés sous forme de carte du monde afin de faciliter leur utilisation.

## 4.3 Abstract

### 4.3.1 Purpose

Ignoring metal speciation in the determination of characterization factors (CFs) in life cycle assessment (LCA) could significantly alter the validity of LCA results since toxicity is directly linked to bioavailability.

### 4.3.2 Materials and methods

Zinc terrestrial ecotoxicity CFs are obtained using modified USEtox fate factors, WHAM 6.0-derived bioavailable factors and effect factors calculated using the AMI method with available terrestrial ecotoxicity data. Soil archetypes created using influent soil properties on Zn speciation (soil texture, pH, CEC, OM and carbonate contents) are used to group soils of the world into a more manageable spatial resolution for LCA. An aggregated global CF value is obtained using population density as a Zn emission proxy. Results are presented in a world map to facilitate their use.

### 4.3.3 Results and discussion

When using soluble Zn as the bioavailable fraction, CF values vary over 1.76 orders of magnitude, indicating that a single aggregated value could reasonably be used for the world. When using true solution Zn, CFs cover 14 orders of magnitude. To represent this variability, 518 archetypes and 13 groups of archetypes were created. Aggregated global default values are  $4.7 \text{ PAF} \cdot \text{m}^3 \cdot \text{d} \cdot \text{kg}^{-1}$  for soluble Zn and  $1.45 \text{ PAF} \cdot \text{m}^3 \cdot \text{d} \cdot \text{kg}^{-1}$  for true solution Zn. These values are respectively 27 and 88 times lower than the Zn terrestrial CF in IMPACT 2002 ( $128 \text{ PAF} \cdot \text{m}^3 \cdot \text{d} \cdot \text{kg}^{-1}$ ).

### 4.3.4 Conclusions

The CFs obtained for Zn, except for soluble Zn, are at least two orders of magnitude lower than current CFs. However, they must be tested in case studies to measure the impact of including Zn speciation in the CF definition for terrestrial ecotoxicity.

### 4.3.5 Keywords

Life cycle impact assessment; metal speciation; modeling; bioavailability; zinc; terrestrial ecotoxicity

## 4.4 Introduction

The ecotoxicological impacts of metals are difficult to evaluate in life cycle assessment (LCA) because the models were developed for organic compounds and do not consider crucial metal properties, which could lead to biases in LCA conclusions [8, 11]. In fact, current models do not take into account speciation, which is directly related to metal toxicity and depends on environmental conditions [10, 11]. Including metal speciation in LCA is not straightforward because the specific soil property data that is required is not available at the global scale.

Recently, two approaches were proposed to address the issue based on the recommendations of the UNEP/SETAC Clearwater working group, which suggested including a bioavailability factor (BF) expressed as the ratio of bioavailable and total metal concentrations in the definition of the characterization factor (CF) [13].

Gandhi et al. determined new freshwater ecotoxicity CFs for six metals: nickel (Ni), copper (Cu), zinc (Zn), cobalt (Co), cadmium (Cd) and lead (Pb) for seven freshwater archetypes using bioavailability factors calculated with the WHAM 6.0 chemical speciation model. These CFs were tested in two case studies (Cu pipe and Zn gutter systems), and the results showed that including metal speciation significantly influenced the contribution of each metal to the total score (sum of CFs \*emissions) and the values of the total metal freshwater ecotoxicity scores attributable to metal emissions, which decreased by one to four orders of magnitude [16]. Dong et al. extended this approach to 14 cationic metals (Al(III), Ba, Be, Cd, Co, Cr(III), Cs, Cu(II), Fe(II), Fe(III), Mn(II), Ni, Pb, Sr and Zn) for the same seven freshwater archetypes [17]. The CFs that were obtained are similar or higher and fall within two orders of magnitude of current USEtox CFs [17].

Owsianiak et al. derived new terrestrial ecotoxicity CFs for Cu and Ni for 760 soils using empirical regressions to determine bioavailable metal fractions [19]. Spatial variability of 3.5 and

3 orders of magnitude were observed between CFs for Cu and Ni (two orders of magnitude in a 95% interval) [19].

In Plouffe et al. [1], the two approaches were confronted in their ability to determine Zn bioavailable fraction with limited available soil data and at global scale. The authors showed that it was possible to use WHAM 6.0 with limited soil data available at the global scale to determine Zn bioavailable fractions. The use of this geochemical speciation model made it possible to obtain a BF based on soluble Zn with a precision of two orders of magnitude for 85% of the test soils for which experimental data were available to validate the model prediction (test soils covering one fourth of the planet's surface), with 72% of the samples falling within the same order of magnitude as the measured values. When using true solution Zn based BF, the results were validated for 56% of the test soils with a precision of two orders of magnitude (44% falling within the same order of magnitude as the measured values). The results of this study indicated that WHAM 6.0 seemed more appropriate than the empirical regressions approach because the BFs obtained with WHAM 6.0 better respected the measured BF ranking, which is important in an LCA context since it is a comparative tool.

The goal of this study was to determine new Zn terrestrial ecotoxicity CFs that include the WHAM 6.0 based BFs. Current ecotoxicity CFs are generally composed of fate and effect factors and sometimes of an exposure factor, as represented in Equation 2 [13, 41].

Équation 4 Current ecotoxicity CF definition [13, 41]

$$CF = FF \cdot EF$$

Fate factors (FFs) represent the fraction of a substance transferred from the emitting to the receiving compartments and takes into account the residence time in the receiving compartment [25]. FFs are obtained with a multimedia model, and the USEtox<sup>TM</sup> model is currently recommended because it is the result of a consensus between LCIA (eco)tox model developers [33, 42, 160]. In USEtox<sup>TM</sup>, an exposure factor that accounts for bioavailability is also included in the CF definition [41]. However, for freshwater ecotoxicity CFs, the model only gives the total soluble metal concentration, which is not necessarily enough to account for bioavailability according to the Clearwater recommendations [13]. Also, USEtox<sup>TM</sup> does not provide any terrestrial ecotoxicity CFs [41]. Effect factors (EF) represent the probable number of incidences of a toxic effect on living organisms according to an absorbed quantity of substance [25]. One



recommended method, which is used in USEtox<sup>TM</sup> and IMPACT 2002 to obtain EFs, is the AMI (assessment of mean impact) method, which determines the geometric mean of EC<sub>50</sub> (concentration of a substance associated with the incidence of an effect in 50% of a population for a certain species) [10, 33-35]. The method requires available EC<sub>50</sub> data covering at least three phyla of an ecosystem to ensure that the biological variability of the ecosystem is covered [10].

The problem is that terrestrial ecotoxicity data on metals are lacking and present a lot of heterogeneity [10]. Nonetheless, Haye et al. showed that it was possible to obtain a general chronic terrestrial HC<sub>50</sub>EC<sub>50</sub> for the following metals and metalloids: As(III) or (V), Be(II), Cr(III) or (VI), Sb(III) or (V), Pb(II), Cu(II), Zn(II) and Ni(II) [10]. Another problem arises when looking at the ecotoxicological data in common databases (INERIS, USEPA Ecotox): some EC<sub>50</sub> are listed according to total metal, soluble or labile concentrations while others do not specify which metal concentration is used. In other words, EC<sub>50</sub> are not necessarily determined in terms of bioavailable metal fraction. Even so, Christiansen et al included speciation in the determination of EFs for freshwater ecotoxicity for Cu [18]. The authors based their calculations on free Cu<sup>2+</sup> ion obtained with the Visual MINTEQ model. However, the use of speciation models requires input on soil type and properties, which is often lacking in ecotoxicological studies. Part of the observed variability between EC<sub>50</sub> for the same metal for the same toxic effect and species could arise from the fact that the metal concentration differs or that test soils have different properties [89, 90]. BFs obtained in Plouffe et al. [1] showed quite considerable variability according to soil properties. It is therefore important to determine a way to harmonize or obtain EC<sub>50</sub> values that are more representative of toxicity.

In the last decade, a new way of modelling metal toxicity, mainly in bodies of water [116], has emerged. The biotic ligand model (BLM) is an interesting approach because it takes into account metal speciation and cation competition in the surroundings of living organisms [82, 83, 117, 118]. It relies on the assumption that metal toxicity is linked to free ions that react with binding sites to form a metal-biotic ligand complex at the water-organism interface [82, 117, 118]. The BLM also considers the competition for binding sites between the metal of interest and other cations (H<sup>+</sup>, Ca<sup>2+</sup>, Mg<sup>2+</sup>, K<sup>+</sup>, Na<sup>+</sup>), which could decrease toxicity [82, 117, 118].

Recently, the TBLM (terrestrial BLM) concept was extended to soils, mostly for Cu and Ni [112, 113, 119-121] and, in a few cases, for Co [117], Zn [122], Cd and Pb [123]. In a TBLM,

the main assumption is that the metal in soil is in equilibrium with the metal in soil solution and that toxicity is associated with the free ions in the soil solution that binds to a BL [112, 123]. Like the BLM, the TBLM takes into account cation competition that could reduce metal toxicity [112, 123]. Thakali applied the TBLM concept for Cu and Ni to barley roots for many types of soils [113], for tomato *Lycopersicon esculentum*, for the worm *Eisenia fetida*, for the springtail *Folsomia candida* and for soil microbes [119]. TBLM seems promising to obtain terrestrial metal EC<sub>50</sub> while taking soil physicochemistry into account [112]. In fact, the authors who derived EC<sub>50</sub> using TBLM observed a variability between experimental and modeled values of not more than a factor of two [112, 123].

In LCA, BLM and TBLMs were used to derive CFs for freshwater ecotoxicity [16] and terrestrial ecotoxicity for Cu and Ni [19]. Ligthart et al. (2010) integrated BLMs to derive new CFs for Zn in the CML2000 methodology [124]. However, when determining bioavailability, they did not consider the effect of soil type on speciation. Although very interesting, the applicability of this method is still quite limited since there are not enough TBLM to derive the EC<sub>50</sub> values required to cover three phyla for metals other than Cu and Ni.

The main goal of this study is to determine CFs for Zn for all soil types of the world and to evaluate the overall spatial variability. First, soil type specific FFs were obtained by integrating WHAM 6.0 derived soil-soil solution partition coefficients in USEtox<sup>TM</sup> and then linking them to BF<sub>s</sub> obtained in Plouffe et al. [1]. Then, EF<sub>s</sub> were determined in order to be coherent with the inclusion of BF<sub>s</sub>. For this, many options were tested and compared (e.g. considering only total, soluble, labile or free ion EC<sub>50</sub> values, deriving EC<sub>50</sub> for different soil types). The CFs were obtained based on the spatial resolution (soil archetypes) defined in Plouffe et al. [1], and the spatial resolution was then refined in order to optimise the representation of the variability of the CFs according to soil type.

## 4.5 Methods

### 4.5.1 Nomenclature

Total Zn represents total Zn concentration in soil. In addition to the elemental form of the metal, it includes at least all the fractions defined here. Part of total Zn, soluble Zn stands for total soluble Zn (free ion, ion pairs and complexes) concentration in soil, and true solution Zn is

defined by free Zn ions and ion pairs in soil solution. Both are needed to calculate BFs and are modeled by a geochemical model. Labile Zn represents Zn extracted mainly with CaCl<sub>2</sub>, and free Zn, the unbound ions in soil solution, as used in ecotoxicity test methodologies in order to derive EC<sub>50</sub>.

#### 4.5.2 General considerations

The CFs calculated in this project follow UNEP-SETAC Clearwater work group recommendations and were obtained using equation 4, in which FF stands for fate factor, BF for bioavailability factor and EF for effect factor [13]:

Équation 5 CF definition as defined by [13]

$$CF = FF \cdot BF \cdot EF$$

#### 4.5.3 Fate factor determination

In this project, FFs are obtained with USEtox<sup>TM</sup> using default parameters, with the exception of the partition coefficient between soil solution and particles (named KP<sub>SI</sub> in USEtox<sup>TM</sup>). Following the methodology used by Gandhi et al. (2011) [16], we relied on partition coefficient values obtained with WHAM 6.0 for each of the 5 213 HWSD soil samples defined in Plouffe et al. [1]. Partition coefficients were obtained by dividing the WHAM 6.0 obtained values of particle bound Zn concentration by total Zn aqueous concentration. Since this study was focused on the terrestrial ecotoxicity of an emission in soil, the FFs considered are for an emission in the continental natural and agricultural soil compartments to the continental and global natural and agricultural soil receiving compartments, thus assuming that the terrestrial ecotoxicity of a metal emission in soil occurs mainly in the soil where the emission occurred. As such, it would be acceptable to modify the K<sub>psi</sub> in order to better represent the fate and effect in a specific soil.

USEtox<sup>TM</sup> was chosen because it is a consensus toxicity model based on collaborative work by the developers of the main related models (CalTOX, IMPACT 2002, USES-LCA, BETR, EDIP, WATSON and EcoSense) [16, 33, 160]. It is also recommended to characterize freshwater ecotoxicity impacts [160] and was used by Gandhi et al. [14-16], Dong et al. [17] and Owsianiak et al. [19].

#### 4.5.4 Bioavailability factor definition

Plouffe et al. [1] obtained BF<sub>s</sub> using WHAM 6.0 for all soils in the Harmonized World Soil Database version 1.1. Details on BF determination, WHAM 6.0 modeling and the choice of Zn may be found in Plouffe et al. (2014) [1].

#### 4.5.5 Effect factor calculation

##### 4.5.5.1 General considerations

As suggested by Haye et al. and in USEtox<sup>TM</sup> [10, 33] for aquatic ecotoxicity, EF<sub>s</sub> were obtained using Equation 5:

Équation 6 EF definition USEtox<sup>TM</sup> [10, 33]

$$EF = \frac{0,5}{HC50_{EC50}} (PAFm^3kg^{-1})$$

##### 4.5.5.2 Gathering terrestrial chronic ecotoxicity data

Terrestrial ecotoxicological effect data for Zn were collected using the INERIS and ECOTOX (US EPA) databases as well as a few other references [90, 151]. Even if some authors assume that it is possible to extrapolate EC<sub>50</sub> estimates from NOEC and LOEC values, we decided to gather only EC<sub>50</sub> and LC<sub>50</sub> values because they are more robust than the extrapolated values [161] and are available for Zn. Moreover, this approach is recommended in the USEtox guidelines to determine ecotoxicity EF<sub>s</sub> since the use of LOEC and NOEC extrapolated values is recommended only when EC<sub>50</sub> values are missing [162]. Whenever possible, the Zn concentration was used to determine the EC<sub>50</sub> data (total Zn, free Zn, labile Zn, and soluble Zn) and soil properties of the test soil. Only data from tests directly performed on soils were collected (either artificial or natural soil). All data are listed in the supporting information (annexe B).

As demonstrated by Haye et al., the use of various metal salts in ecotoxicity tests does not significantly influence EC<sub>50</sub> values [10]. Collected EC<sub>50</sub> data was therefore made indistinctly for the following Zn species: zinc (CAS 7440666), zinc oxide (CAS 1314132), zinc chloride (CAS 7646857), zinc sulfate (CAS 7733020) and zinc nitrate (CAS 7733020). However, as in Haye et al., the EC<sub>50</sub> values obtained for each salt were converted into pure Zn EC<sub>50</sub> [10]. Also, EC<sub>50</sub> must be expressed in mg/kg, kg/m<sup>3</sup> or mg/l and, when necessary, the mean mass fraction of water

in soil (0,27) obtained by Wenzel et al. was used [10]. If not specified, it was assumed that total Zn was used to obtain  $EC_{50}$  values and that  $EC_{50}$  were listed in mg/kg.

#### 4.5.5.3 Calculation of $HC50_{EC50}$

The following steps were taken to obtain  $HC50_{EC50}$ :

- Convert acute into chronic  $EC_{50}$  values by dividing by a factor 2 [41] whenever necessary.
- For each species, take the geometric mean of every chronic  $EC_{50}$  value [34].
- For each phylum, take the geometric mean of chronic  $EC_{50}$  values [10].
- Take the geometric mean of all the phylum values to obtain the  $HC50_{EC50}$ .

For soil ecotoxicity data, each phylum is not always equally represented. Taking the geometric mean of  $EC_{50}$  values for each phylum before calculating  $HC50_{EC50}$  avoids giving too much weight to an overrepresented phylum [10, 34]. However, using the geometric mean assumes that the data follows a lognormal distribution, which is not always the case [34]. An acute-to-chronic ratio of two was selected because it is recommended as a starting point [34]. As in Haye et al., we considered that chronic  $EC_{50}$  data correspond to ecotoxicological tests with an exposure of at least 14 days [10].

Various assumptions were tested in order to find the most coherent way to use existing  $EC_{50}$  data in combination with BFs. These assumptions are presented in Tableau 4.1.

Tableau 4.1  $EC_{50}$  values and soil characteristics included in the various assumptions tested to determine  $HC50_{EC50}$

Options		$EC_{50}$ values included in $HC50_{EC50}$ determination					
		Unspecified Zn speciation	Total Zn	Soluble Zn	Labile Zn	Free Zn	Consideration of soil type variability
1	STATUS QUO	x	x	x	x	x	No
2	EF total		x				No
3	EF soluble			x			No
4	EF labile				x		No
5	EF free ion					x	No
6a	EF pH (pH<6,75)		x				Yes
6b	EF pH (6,75≤pH≤7,2)		x				Yes
6c	EF pH (pH>7,2)		x				Yes

7a	EF OM (OM<4%)		x				Yes
7b	EF OM (4%≤OM≤9%)		x				Yes
7c	EF OM (OM<9%)		x				Yes

In the first assumption (status quo), we calculated a single effect factor using all the EC<sub>50</sub> values listed, regardless of whether they were expressed in terms of total, soluble or labile Zn, as would be the case in current methodologies. In options 2 to 5, we made the distinction between the total, soluble and labile Zn concentrations used to determine the EC<sub>50</sub> values. In options 6 and 7, we calculated EF factors according to two common soil properties in ecotoxicity databases: pH and OM. Three groups of soil properties were created using the same divisions as for the soil archetypes defined in Plouffe et al. [1] (represented by options 6a, b, c and 7a, b, c). For options 6 and 7, only total Zn values were considered since pH and OM content could potentially influence the bioavailable concentration, and the influence of soil type is already included in the soluble and labile Zn EC<sub>50</sub> values. The various HC50<sub>EC50</sub> were then compared in order to select the most appropriate option.

When including a BF in the CF definition, EF factors must be expressed in terms of bioavailable concentration instead of total concentration. As discussed earlier, in previous studies, certain authors tried to adjust EC<sub>50</sub> values in order to take into account metal speciation and obtain EC50 in terms of bioavailable concentration. In fact, Gandhi et al. (2010, 2011) and Christiansen al. (2011) used a speciation model (WHAM 6.0 or Visual Minteq) to convert EC<sub>50</sub>s in order to obtain effect data in terms of true solution or free ion concentrations. However, due to the lack of data on soil properties used to derive Zn terrestrial EC<sub>50</sub> values, speciation models cannot be used in this study. Unless additional ecotoxicological data is obtained or additional TBLMs are derived, Zn EFs must be derived from existing Zn EC<sub>50</sub> data without transformation. While they may be less representative, we consider that they will induce less uncertainty than using a speciation model without appropriate input data.

#### 4.5.6 CF calculation

CFs were obtained for the 5 213 HWSD soil samples. In order to determine the impact of adding a BF to the CF calculations, a USEtox derived CF was also calculated without including

metal speciation using current USEtox FF and EF values from the status quo assumption (EF STATUS QUO).

#### 4.5.7 Spatial resolution

At first, the spatial resolution used in this project was the same as the one defined in Plouffe et al.[1]. For each of the 231 archetypes, two series of CFs were obtained: one using soluble Zn and another using true solution Zn. The series were treated separately. For each archetype and series, mean, median, minimum and maximum CF values were obtained. A difference between minimum and maximum values of two orders of magnitude or lower for the CFs of an individual archetype was considered acceptable since it corresponds to acceptable BF uncertainty in Plouffe et al. [1] and to the current acceptable LCA uncertainty for ecotoxicity [33, 44]. If higher differences were noted in individual archetypes, spatial resolution was refined (addition of new subgroups or archetype combinations) in order to more adequately express the variability of the CFs. The distribution of the CFs and soil archetypes is illustrated in world maps.

If there is no information on the emission location, it is possible to use a global aggregated CF value for the world. To obtain this aggregated CF value, two maps are intersected with ArcGIS version 9.3: the HWSD map with the CF values corresponding to each soil sample and a map of population density. The global aggregated CF value ( $CF_{global}$ ) is then obtained using Équation 7 below.

Équation 7 Global aggregated CF value equation

$$CF_{global} = \frac{\sum(Pop_{grid} \cdot CF_{grid})}{Pop_{total}}$$

In this equation,  $Pop_{grid}$  and  $CF_{grid}$  represent respectively the population and the CF value corresponding to each grid of the map resulting from the intersection of the two initial map and  $Pop_{total}$  represent the total population of the world.

The population density proxy was used since the main anthropogenic sources of Zn in soils come from industrial activities such as smelters, refining operations, garbage incineration, atmospheric deposition (from automobile emissions, fuel combustion), sewage treatment sludge and hazardous waste sites [163-166]. It seems logical to use a proxy based on population density, assuming that the industrial activities that generate Zn emissions are more extensive when

population density is higher. This proxy was also chosen because it is the proxy used to aggregate CFs in other impact categories in the IMPACT World method ([www.impactworldplus.org](http://www.impactworldplus.org)). For this step, the Gridded Population of the World: Future Estimates (GPWFE) map was used [167].

## 4.6 Results and discussion

### 4.6.1 Fate factors

Tableau 4.2 presents the FFs obtained as part of this project as compared to USEtox<sup>TM</sup> FFs [42].

Tableau 4.2 Fate factors obtained for the 5213 HWSD soil samples as compared to USEtox<sup>TM</sup> default FFs[days] [42]

<i>Fate factors - FF [day]</i>		Emission compartments			
		Continental natural soil (CNS)			
		Default USEtox <sup>TM</sup> $K_{PSI}$	FF (Min)	FF (Max)	FF (median)
<b>Receiving compartments</b>	Continental natural soil (CNS)	1.16E+05	3.59E+01	1.18E+06	7.42E+03
	Continental agricultural soil (CAS)	8.26E-15	2.76E-18	2.87E-14	5.68E-16
	Global natural soil (GNS)	3.22E-15	9.22E-19	5.39E-14	1.92E-16
	Global agricultural soil (GAS)	3.22E-15	9.22E-19	5.39E-14	1.92E-16
<i>Fate factors - FF [day]</i>		Emission compartments			
		Continental agricultural soil (CAS)			
		USEtox <sup>TM</sup>	FF (Min)	FF (Max)	FF (median)
<b>Receiving compartments</b>	Continental natural soil (CNS)	8.26E-15	2.76E-18	2.87E-14	5.68E-16
	Continental agricultural soil (CAS)	1.16E+05	3.59E+01	1.18E+06	7.42E+03
	Global natural soil (GNS)	3.22E-15	9.22E-19	5.39E-14	1.92E-16
	Global agricultural soil (GAS)	3.22E-15	9.22E-19	5.39E-14	1.92E-16

The 5 213 FFs obtained using WHAM 6.0 calculated  $K_{PSI}$  ( $K_{PSI}$  values varying between 1.11E-01 L/kg and 2.68E5 L/kg, the median value being 5.49E1 L/kg) present a variability of around 4 to 5 orders of magnitude for each emission and receiving compartment. The USEtox<sup>TM</sup> FFs also fall within the range of newly obtained FFs, and most Zn emitted in a soil compartment remains in the emission compartment no matter the  $K_{PSI}$  value, confirming the validity of the assumption that local soil parameters can be used to model metal fate for a direct emission to soil. In fact, emissions from continental natural soil in continental natural soil (CNS-CNS) have the



highest FF value (1.16E05days) as compared to emissions from continental natural soil in all other compartments (3.22E-15, 3.22E-15 and 8.26E-15 days, respectively, for CNS-GNS, CNS-GAS and CNS-CAS). No distinction is made between natural and agricultural soils: FF values are the same for CNS-CNS and CAS-CAS emission patterns. For this reason, only CNS-CNS emission pattern results are presented in this study. Also, considering agricultural soil as impacted in the same way as natural soil is debatable since agricultural soil is generally considered part of the technosphere. The EF should therefore only be applied to the metal fraction that ends up in natural soil.

#### 4.6.2 Bioavailability factors

BFs previously obtained by Plouffe et al. [1] and used in this study for true solution Zn span over 18 orders of magnitude (between 4.62E-19 and 8.48E-01) with a median value of 1.18E-02 and those obtained for soluble Zn span over five orders of magnitude (between 2E-06 and 8.48E-01) with a median value of 1.22E-02.

#### 4.6.3 Effect factors

Tableau 4.3 presents EF values, number of EC<sub>50</sub> used and phyla represented.

Tableau 4.3 EFs calculated for each option selected

Options for calculating EF		EF (PAF·m <sup>3</sup> ·d·kg <sup>-1</sup> )	Number of EC <sub>50</sub> used to derive EF	Number of phyla represented
1	STATUS QUO	2.50E-03	567	4
2	EF total	1.97E-03	465	4
3	EF soluble	5.48E-02	55	3
4	EF labile	1.78E-02	46	3
5	EF free ion	5.78E-04	1	1
6a	EF property - acid pH	2.11E-03	240	4
6b	EF property - neutral pH	1.33E-03	28	4
6c	EF property - basic pH	1.32E-03	55	4
7a	EF property - low OM	2.03E-03	173	4
7b	EF property - moderate OM	2.84E-03	52	4
7c	EF property - high OM	1.29E-03	120	4

When we tried to make a distinction between Zn species in order to account for speciation in EF calculations, the number of available EC<sub>50</sub> was considerably reduced (from 567 covering 4

phyla to 55 covering 3 phyla when considering only soluble Zn derived  $EC_{50}$  to only 1  $EC_{50}$  for Zn ion), thus limiting the representation of the ecosystem to much fewer species, especially if we consider Zn ion. The option 5 derived EF value for free Zn is therefore irrelevant since it only relies on one  $EC_{50}$  value. However, for soluble and labile Zn, while the number of  $EC_{50}$  is considerably reduced, the condition of covering three phyla is still respected.

EFs are presented in the figures below. Figure 4.1 presents EFs calculated for options 2 to 5 as compared to option 1. Figure 4.2 presents EFs calculated for options 6 and 7 as compared to option 1.

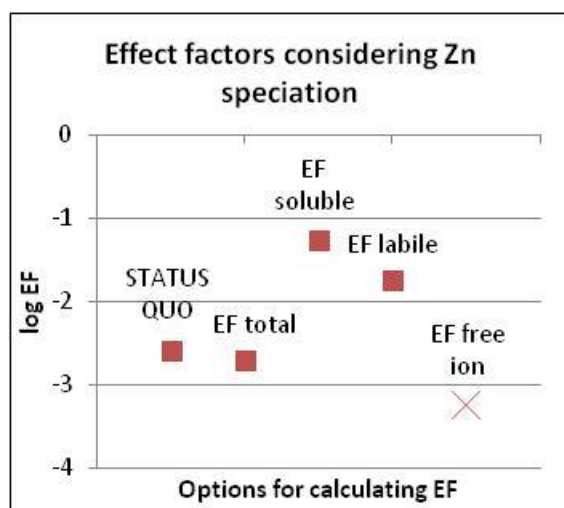


Figure 4.1 Effect factors calculated for options 2-5, separating  $EC_{50}$  according to speciation (total, soluble, labile and free ion Zn)

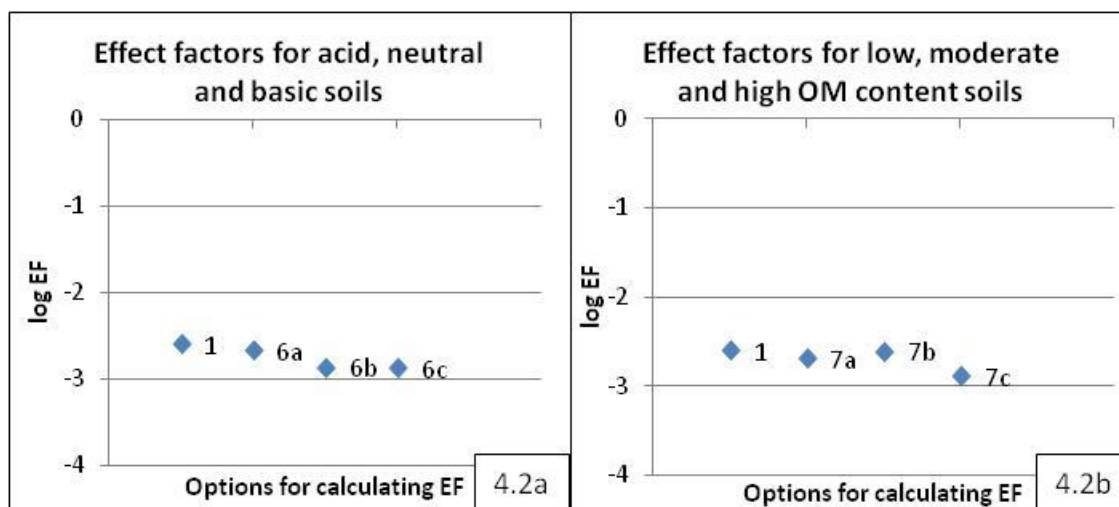


Figure 4.2 Effect factors calculated for option 6 (subdivision according to pH) and 7 (subdivision according to OM content)

Figures 4.2a and 4.2b indicate that making a division between soil groups of different properties does not considerably influence the EFs. In fact, the EF values for acid ( $2.53\text{E-}03 \text{ PAF}\cdot\text{m}^3\cdot\text{d}\cdot\text{kg}^{-1}$ ), neutral ( $1.33\text{E-}03 \text{ PAF}\cdot\text{m}^3\cdot\text{d}\cdot\text{kg}^{-1}$ ) and alkaline soils ( $1.32\text{E-}03 \text{ PAF}\cdot\text{m}^3\cdot\text{d}\cdot\text{kg}^{-1}$ ) are very similar. This is also the case for soils divided based on OM content. EFs calculated for low ( $2.39\text{E-}03 \text{ PAF}\cdot\text{m}^3\cdot\text{d}\cdot\text{kg}^{-1}$ ), moderate ( $2.84\text{E-}03 \text{ PAF}\cdot\text{m}^3\cdot\text{d}\cdot\text{kg}^{-1}$ ) and high ( $1.93\text{E-}03 \text{ PAF}\cdot\text{m}^3\cdot\text{d}\cdot\text{kg}^{-1}$ ) OM content soils are also very similar.

However, as illustrated in Figure 4.1, when including speciation, variations between EF values are higher. In fact, when separating  $\text{EC}_{50}$  values in terms of total, soluble or labile Zn, a difference of more than one order of magnitude is observed ( $1.97\text{E-}03 \text{ PAF}\cdot\text{m}^3\cdot\text{d}\cdot\text{kg}^{-1}$  for total Zn,  $5.48\text{E-}02 \text{ PAF}\cdot\text{m}^3\cdot\text{d}\cdot\text{kg}^{-1}$  for soluble Zn and  $1.78\text{E-}02 \text{ PAF}\cdot\text{m}^3\cdot\text{d}\cdot\text{kg}^{-1}$  for labile Zn). The free ion Zn EF cannot be considered representative since it only relies on one  $\text{EC}_{50}$  value, highlighting the need to derive more  $\text{EC}_{50}$ , including Zn speciation, in order to obtain more representative EF values. This is even more important than distinguishing soil types. Normally, higher EF values would indicate a higher toxicity. This is not necessarily surprising, as the most toxic Zn species are included in the soluble and labile Zn fractions [58, 78]. However, there were much less species (46 for labile Zn, 55 for soluble Zn as compared to 465 for total Zn) included in the determination of soluble and labile Zn EFs. The differences could also stem from the lower coverage of the species of the ecosystem, even if the three phyla rule was followed.

For these reasons and considering the lack of more specific data, we selected two EF values that were applied indistinctly to all soil archetypes in this study. Two series of CFs were computed: one in terms of soluble Zn using soluble Zn EF (option 3) ( $5.48\text{E-}02 \text{ PAF}\cdot\text{m}^3\cdot\text{d}\cdot\text{kg}^{-1}$ ) and another in terms of true solution Zn using labile Zn EF (option 4) ( $1.78\text{E-}02 \text{ PAF}\cdot\text{m}^3\cdot\text{d}\cdot\text{kg}^{-1}$ ).

#### 4.6.4 Characterization factors

New CFs obtained for Zn are presented in Figure 4.3 and compared to a USEtox derived generic terrestrial CF (USEtox FF multiplied by EF STATUS QUO) and IMPACT 2002 soil CF for Zn. The uncertainty indicates the minimum and maximum values obtained for new CFs.

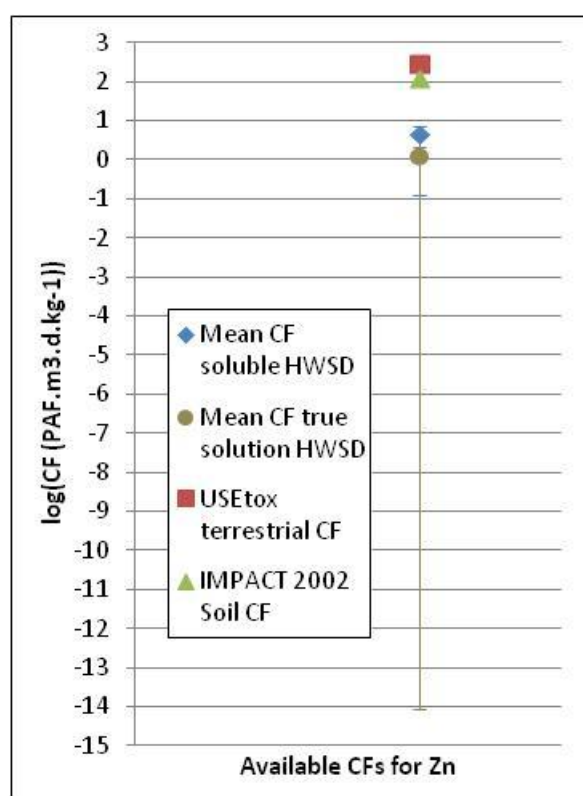


Figure 4.3 New CFs as compared to USEtox derived terrestrial CF and IMPACT 2002 soil CF for soluble and true solution Zn for a CNS-CNS emission-reception pattern

As seen in Figure 4.3, by introducing Zn speciation based on soluble Zn, terrestrial ecotoxicity CFs for Zn decrease, sometimes considerably, when we compare the CFs used in the current IMPACT 2002 method and USEtox derived terrestrial CFs. The spread of CFs is even

greater when using CFs obtained using true solution Zn. Another point that can be observed in Figure 4.3, is that both global aggregated CF values fall within the same order of magnitude.

The larger share of the potential impact of Zn emitted to soil occurs within the compartment of emission; only a small fraction of this emission is transferred to other compartments. The spatial variability of CFs is considerably lower than for BF: 14.37 orders of magnitude for true solution CFs as compared to 18.26 orders of magnitude for true solution BFs and 1.76 for soluble CFs as compared to 5.63 orders of magnitude for soluble BFs, showing the combined influence of FF and BF in CF calculation. To put these results into perspective, the spatial variability of terrestrial ecotoxicity CFs based on true solution Zn obtained in this study is considerably higher than the one obtained for European freshwaters by Gandhi et al. and Dong et al. (around 0.9 orders of magnitude [14, 17]. Perhaps this span would be higher if CFs were developed for all the freshwaters of the world. Nonetheless, the 14 orders of magnitude obtained in this study for true solution CFs indicate the importance of including Zn speciation in CF calculation for terrestrial ecotoxicity. This variability is also much greater than that in Owsianiak et al. for Cu and Ni (3 and 3.5 orders of magnitude, with 2 orders of magnitude with a 95% confidence interval) [19]. The difference could be due to the differences in Zn, Cu and Ni speciation, different methodological choices and soil coverage, since Owsianiak et al. did not consider calcareous soils [19].

#### **4.6.5 Spatial resolution – archetype definition**

The results presented here are for the 5 213 soil samples used to obtain BFs for Zn. To obtain a more manageable number of CFs, 231 soil archetypes were created by Plouffe et al. (2014) according to the main, globally available soil properties that influence Zn speciation [1]. The condition to accept this new spatial resolution was fixed to a difference between the minimum and maximum CF value not higher than 2 orders of magnitude for each individual soil archetype. This condition is in-line with the acceptable uncertainty in LCA toxic impact assessment [33, 44]

When looking at soluble Zn, this condition is mostly respected. In fact, for a CNS-CNS emission-reception pattern, the difference between the new CFs is not more than 1.76 orders of magnitude (between  $1,29\text{E-}01$  and  $7,42\text{E}0 \text{ PAF}\cdot\text{m}^3\cdot\text{d}\cdot\text{kg}^{-1}$ ). For true solution Zn, the conclusions are different. CFs span over 14.37 orders of magnitude for CNS-CNS emission-reception patterns

(from  $8.83\text{E-}15$  to  $2.05\text{E}00$   $\text{PAF}\cdot\text{m}^3\cdot\text{d}\cdot\text{kg}^{-1}$ ), with a 5.45 order of magnitude when considering a 95% confidence interval (from  $6.42\text{E-}6$  to  $1.83\text{E}00$   $\text{PAF}\cdot\text{m}^3\cdot\text{d}\cdot\text{kg}^{-1}$ ). To adequately represent these large variations in the case of true solution Zn, the use of soil archetypes appears to be an interesting way to not only show the extent of the variation but also to reduce the soil samples to a more manageable number for global scale impact assessment.

However, when we combined soil samples according to the 231 previously defined soil archetypes (see description in the supporting information, annexe B), only 147 of 231 soil archetypes (around 63.6%) presented an intra-archetype variability of less than two orders of magnitude (see details in the supporting information, annexe B). Some archetypes showed a very large spread of CF values (19 archetypes have a spread of more than 10 orders of magnitude), indicating that the spatial resolution must be refined.

The first step was to refine the subgroup definition for each selected soil property. Instead of the three subgroups for each soil property, we created five subgroups for each selected soil property (pH, OM and  $\text{CaCO}_3$  content and CEC) according to the HWSO soil property description [159], making it possible to create 518 soil archetypes (see description in the supporting information, annexe B)—430 of which had an intra-archetype variability of less than two orders of magnitude, representing about 83% of all the archetypes (see details in the supporting information). The archetypes that presented the highest variability (over nine orders of magnitude) were mostly archetypes of soils with very high pH values ( $>8.5$ ), low OM content ( $<4\%$ ) and some  $\text{CaCO}_3$  (between 2 and 40%).

This method, however, gives a lot of weight to outliers. When looking at the archetypes for which the two orders of magnitude condition is respected in a 95% confidence interval, we observed that 441 of the 518 archetypes (around 85%) respect this condition (see details in the supporting information, annexe B).

In order to present results that are more manageable in LCA, the 518 archetypes were grouped into 13 categories according to their median values, which are represented in Figure 4.4.

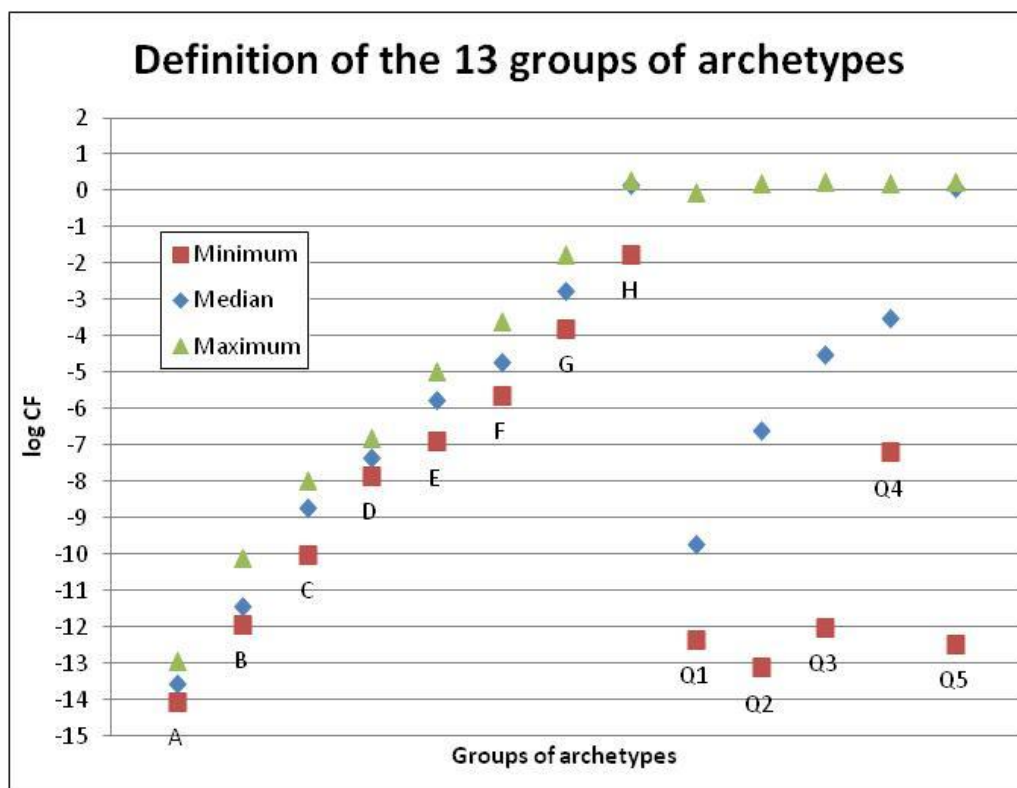


Figure 4.4 Definition of the 13 groups of archetypes

These groups were created in order to reflect the spread of median values and respect a maximum of two orders of magnitude variation between CFs within a group (A to H groups). Of the thirteen groups, five (Q1 to Q5) represent the 88 archetypes (of the 518 created) for which the intra-archetype variability is greater than two orders of magnitude. Five groups were required to reflect the spread of the median values even if the uncertainties overlap. The results for 518 individual archetypes for soluble and true solution Zn and for the 13 groups for true solution Zn are detailed in the supporting information (annexe B).

#### 4.6.6 CFs map and final results

After intersecting CF results with a population density map, the aggregated global default CF value based on soluble Zn is  $4.70 \text{ PAF} \cdot \text{m}^3 \cdot \text{d} \cdot \text{kg}^{-1}$  (minimum and maximum values being, respectively,  $0.18$  and  $7.43 \text{ PAF} \cdot \text{m}^3 \cdot \text{d} \cdot \text{kg}^{-1}$ ). This CF value is about 27 times lower than the one currently used for Zn terrestrial CF in IMPACT 2002 ( $128 \text{ PAF} \cdot \text{m}^3 \cdot \text{d} \cdot \text{kg}^{-1}$ ) and about 62 times lower than the USEtox derived terrestrial CF ( $292 \text{ PAF} \cdot \text{m}^3 \cdot \text{d} \cdot \text{kg}^{-1}$ ) without accounting for speciation. Given the low spatial variability of the CF based on soluble Zn, we recommend the

use of the global default CF regardless of the type of soil in which the Zn is emitted if soluble Zn is chosen.

Using the same procedure as for soluble Zn, the aggregated global default CF value based on true solution Zn is  $1.45 \text{ PAF} \cdot \text{m}^3 \cdot \text{d} \cdot \text{kg}^{-1}$  (minimum and maximum values being, respectively,  $9.41\text{E-}15$  and  $2.05 \text{ PAF} \cdot \text{m}^3 \cdot \text{d} \cdot \text{kg}^{-1}$ ), which is very similar to the CF value for group H soils. This CF value is about 88 times lower than the current Zn terrestrial CF in IMPACT 2002 ( $128 \text{ PAF} \cdot \text{m}^3 \cdot \text{d} \cdot \text{kg}^{-1}$ ) and about 201 times lower than the USEtox derived terrestrial CF ( $291.6 \text{ PAF} \cdot \text{m}^3 \cdot \text{d} \cdot \text{kg}^{-1}$ ). However, considering the high variability of true solution CF values, the discrepancy between these new CFs and current CF values could be considerably higher for certain soil types.

The results for true solution Zn are illustrated in the maps below (Figure 4.5). The first map (A) represents the 13 groups created according to CF values obtained for true solution Zn. The second map (B) represents the same 13 groups but with the 95% confidence interval results.



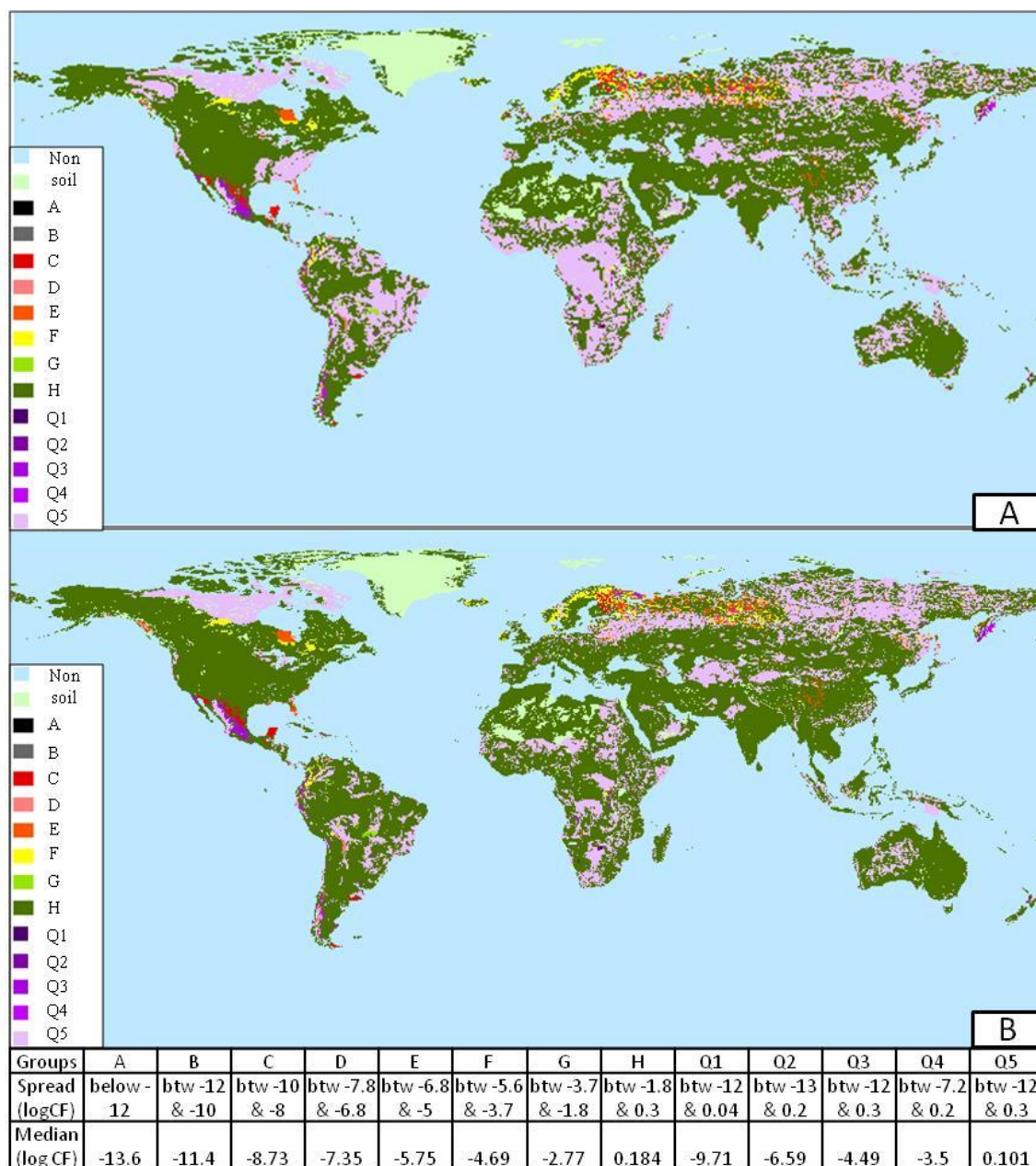


Figure 4.5 Maps of the world indicating the 13 groups of soil according to CF values when considering all soil samples (A) and when considering a 95% confidence interval (B)

As seen in the maps, the two orders of magnitude condition is respected in most parts of the world likely to receive Zn emissions. We can also see that a majority of soils correspond to group H with a median CF value of  $1.53 \text{ PAF} \cdot \text{m}^3 \cdot \text{d} \cdot \text{kg}^{-1}$  (minimum  $1.35 \text{ PAF} \cdot \text{m}^3 \cdot \text{d} \cdot \text{kg}^{-1}$  and maximum  $87.3 \text{ PAF} \cdot \text{m}^3 \cdot \text{d} \cdot \text{kg}^{-1}$ ), which could be used as a relevant alternative to the global default value for Zn CF obtained in this study.

In light of these results, we can affirm that CFs obtained using soluble Zn are issued from more robust and easily available data. However, considering the spatial variability of true solution Zn, part of the relevant bioavailability information may be lost by using soluble Zn based CFs. However, it is still interesting to see that global default CF values obtained using soluble and true solution Zn fall within the same order of magnitude and that both CFs are 1 to 2 orders of magnitude lower than the CFs currently used in LCAs. Both approaches are recommended, depending on whether LCA users want to favour: results that have been validated with field data (based on soluble Zn) or results that are based on a metal fraction that is more representative of the Zn bioavailable fraction (the true solution Zn CFs). This choice should not significantly influence LCA results when using global default values since the general uncertainty in ecotoxicity is greater than the difference between the two recommended CF values. However, if specific emission data are available in a localized LCA, using either soluble Zn or true solution Zn based CFs could induce a considerable difference in LCA results, considering the difference of 14 orders of magnitude (5.45 with a 95% confidence interval) with the CFs obtained with true solution.

## 4.7 Conclusion

The objective of the work was to obtain new CFs for terrestrial ecotoxicity for Zn emitted in soils. The results indicate that including Zn speciation in the CF definition considerably reduces the terrestrial ecotoxicity CF value for Zn as compared to current CFs, even when soluble Zn is considered to be the bioavailable fraction. When using soluble Zn, the use a global aggregated CF value for any Zn emission in the world would be sufficient, as the CF variability is around 1.76 orders of magnitude for the various soil types. Spatial variability is considerably greater (around 14 orders of magnitude and 5.45 with a 95% confidence interval) when using true solution Zn. The results are presented with various levels of aggregation in order to make them operational regardless of the level of data available. If precise soil data (soil texture, pH, CEC, OM and carbonate contents) is available, LCA users will be able to match soil data to the corresponding archetype and then use the appropriate median value as CF. If the location of emission is known, LCA users will be able to use the soil map of the world and use the corresponding CF values. If no information on soil type and emission location is available, global aggregated values can be used. In any case, LCA users will also be able to determine the extent

of variability, knowing the minimum and maximum possible CF values corresponding to the median value.

The results also highlighted the limited availability of terrestrial ecotoxicity data for metals, especially with regards to the soil properties used to obtain the EC50 values, which could also impact the CF values.

Since including speciation in CF definition yields considerably reduced CF values for Zn, these new CF values must be tested in case studies in order to determine whether their use alters LCA results.

## **CHAPITRE 5 TROISIÈME MANUSCRIT: CASE STUDY: DOES TAKING ZINC SPECIATION INTO ACCOUNT IN TERRESTRIAL ECOTOXICITY MAKE A DIFFERENCE FOR LIFE CYCLE ASSESSMENT RESULTS?**

### **5.1 Lien entre le deuxième et le troisième manuscrit**

L'étape suivante est de réaliser une étude de cas pour laquelle la contribution du Zn aux impacts écotoxicologiques terrestres est importante en utilisant les FC obtenus dans le deuxième manuscrit et en comparant les résultats obtenus avec les FC actuellement utilisés afin d'évaluer l'importance d'intégrer la spéciation du Zn en ACV.

### **5.2 Présentation du troisième manuscrit**

Dans ce troisième manuscrit, une étude de cas sur la donnée écoinvent "market for electricity, low voltage CA-QC" a été effectuée en utilisant la méthodologie ACV IMPACT 2002+. Cette donnée contient toutes les émissions et la consommation de ressources liée à la production de 1kWh dans un contexte où l'hydroélectricité est la principale source d'électricité. Plusieurs scénarios ont été testés, certains ne prenant pas en compte la spéciation comme c'est le cas actuellement en ACV et d'autres basés sur les FC obtenus dans le cadre de ce projet qui la considèrent. Ainsi, deux scénarios représentaient la situation actuelle, à savoir, le FC pour l'écotoxicité terrestre actuel du modèle IMPACT 2002 et un FC pour l'écotoxicité terrestre dérivé à partir du modèle USEtox. Pour ceux qui considèrent la spéciation, les valeurs génériques de FC basées sur le Zn soluble et le Zn vraiment dissout, ainsi que les valeurs minimales et maximales des FC régionalisés ont été testées. La contribution du Zn émis dans le sol ( $\text{PDF.m}^2.\text{yr}$ ) pour l'écotoxicité terrestre et pour la qualité des écosystèmes, le rang du Zn parmi les substances qui contribuaient le plus à ces catégories d'impacts et de dommages et le score d'impact total pour l'écotoxicité terrestre pour les différents scénarios ont été comparés afin d'évaluer l'importance d'intégrer la spéciation du Zn en écotoxicité terrestre. Finalement, des recommandations ont été faites aux analystes désirant intégrer ces nouveaux FC dans leurs ACV.

### 5.3 Abstract

Metals are a major concern in life cycle assessment (LCA) because they dominate the ecotoxicological impacts due to the use of models that do not consider metal speciation. The objective of this study was to measure the influence of zinc (Zn) speciation on LCA results and evaluate the importance of including it in LCA. A case study in which ecosystem quality impacts are dominated by Zn when using the current characterization factor (CF) for Zn was performed on the market for electricity, low voltage CA-QC ecoinvent data using the IMPACT 2002+ methodology. Different CFs for Zn were tested: IMPACT 2002 CF and USEtox-derived terrestrial CF without speciation, generic default CF values for the world and minimum and maximum regionalized CF values including speciation based on either soluble or true solution Zn. For each scenario, the contribution of Zn emitted to soil to the terrestrial ecotoxicity impact category and ecosystem quality damage category scores, the rank of Zn emitted to soil as a contributor to the terrestrial ecotoxicity impact category and the total terrestrial ecotoxicity impact score were determined and compared with those obtained using the other CFs for Zn. In this case study, when including speciation, the contribution of Zn emitted to soil to the terrestrial ecotoxicity impact score falls from 26% to a maximum of 1.27%; the impact score of Zn emitted to soil drop by 1.44 to 14.37 orders of magnitude; the total terrestrial ecotoxicity and ecosystem quality impact scores decrease by approximately 25% and 21%, respectively; and among the major contributors to terrestrial ecotoxicity, Zn falls from the 2nd to between the 9th and 255th position. Considering that the contribution of all metals emitted to soil represents between 56.2 and 75.7% of the total terrestrial ecotoxicity impact score for this case study, results highlight the need to include metal speciation in LCA and the considerable influence it could have on ecotoxicological impacts.

### 5.4 Highlights

- An ecoinvent market for electricity-low voltage CA-QC data LCA case study is done
- Terrestrial ecotoxicity characterization factors including Zn speciation are tested
- Total terrestrial ecotoxicity and ecosystem quality scores decrease by 25 and 21%

- Contribution of Zn emitted to soil to terrestrial ecotoxicity is reduced (26 to 1%)
- Zn potentially falls from 2nd to 9th to 255th position for terrestrial ecotoxicity

## 5.5 Keywords

Life cycle assessment; zinc; metal speciation; electricity

## 5.6 Introduction

Life cycle assessment (LCA) is a systematic and comparative decision-making approach aiming to determine the environmental impacts of a product, service or process throughout its entire life cycle and for a specific function [26]. As described in ISO 14040 and recognized by the United Nations Environmental Programme (UNEP) and the Society of Environmental Toxicology and Chemistry (SETAC), LCA involves four steps: goal and functional unit definition, life cycle inventory, life cycle impact assessment (LCIA) and interpretation [26]. It considers all emissions and resource consumption occurring throughout a life cycle, including raw materials extraction and refining, energy consumption, product manufacturing, use and end of life and takes into account various impact categories: climate change, acidification, eutrophication, ozone depletion, photo-oxidant formation, resource depletion, toxicological and ecotoxicological impacts [25, 27]. In LCIA, impact scores are calculated by multiplying the mass of a substance emitted to an environmental compartment by a characterization factor (CF) [10, 11, 25] and compared [25]. CFs are obtained through various models adapted to each impact category and represent the contribution of an emitted substance to an impact category for a given environmental compartment, or, in other words, the relative impact of a substance as compared to a reference substance [11, 25].

For ecotoxicological impacts, CFs are calculated using fate and effect modeling [10, 25]. The models and assumptions made to obtain CFs differ from one LCIA methodology to the next, from a partial evaluation taking into account key physicochemical environmental properties (EDIP 2003) to multimedia models (USES-LCA, IMPACT 2002 and USEtox) [33, 36, 37]. Some models consider the spatial variability of key environmental parameters (e.g. spatial version of IMPACT 2002) and it is recognized that using regionalized CFs can improve impact assessment (Huijbregts et al., 2001; Godin, 2004; Toffoletto et al., 2007).

The ecotoxicological impacts of metals are a major concern in LCIA. In a recent study, eight different LCA methodologies (Stepwise (2006), IMPACT 2002+, EDIP 2003, Eco-Indicateur 99, CML 2001, TRACI 2, ReCiPe, USEtox) were compared for the ecotoxicological impacts of metals [9]. Authors have shown that there is little agreement between methods both in the impact score and the toxicity ranking of metals and that, generally, metals are the greatest contributors to ecotoxicological impacts, with contributions representing over 90% of total ecotoxicological impacts. Some metals, like Cd, Hg, Ag and Cu, are generally among the most toxic metals and represent about 25% of ecotoxicological impacts. For other metals, like Be, Cr(VI), Ni and Zn, the different methods yield contradictory results [9]. Also, LCA methods generally give CFs for around 15 metals, but the choice of metals varies from one method to the next [9]. Also, the methods do not take into account ecotoxicological impacts in the same way: some, like USEtox, only consider freshwater ecotoxicity [33], while others, like ReCiPe, focus on freshwater, marine and terrestrial ecotoxicity [45]. Some LCA users therefore choose to omit metals from the ecotoxicological impacts—a decision that could influence LCA conclusions and raise a credibility issue [9, 36, 47]. However, this domination is not necessarily due to an extreme toxicity but to the inappropriate use of fate and effect models. In fact, models used in LCA were developed for organic compounds and are applied without any distinction to metals, even if their properties differ significantly [6, 10, 11]. The toxicity of metals is linked to speciation, which depends on the physicochemical properties of the environment [6].

These issues were recognized by two UNEP/SETAC life cycle initiative workgroups in the last decade: Apeldoorn [12] and Clearwater [13]. The Clearwater workgroup reached a consensus on a proposed framework to include metal speciation in LCA [13]. Authors suggested including speciation in the CF definition by adding a bioavailable factor (BF) defined as the ratio of bioavailable concentration (represented by true solution concentration ions and ion pairs and obtained with a geochemical speciation model) divided by total metal concentration [13]. They suggest considering the spatial variability of key environmental parameters through the creation of archetypes [13]. Following these recommendations, Gandhi et al. obtained CFs including metal speciation for the freshwater ecotoxicity of six metals (Co(II), Cu(II), Cd(II), Ni(II), Pb(II) and Zn(II)) for seven freshwater archetypes (defined according to pH, dissolved organic matter and hardness), with the BF calculated using the WHAM 6.0 geochemical speciation model [14-16]. New CFs were tested in two case studies: a Zn gutter system and a Cu pipe [16]. The results

showed that including metal speciation significantly modifies the contribution of each metal to the total score for freshwater ecotoxicity and that the scores attributed to metal emissions were between one and four orders of magnitude lower than the scores obtained without taking speciation into account [16]. These results demonstrate the importance of taking speciation into account in LCA.

Gandhi et al.'s approach was standardized and extended to 14 cationic metals (Al(III), Ba, Be, Cd, Co, Cr(III), Cs, Cu(II), Fe(II), Fe(III), Mn(II), Ni, Pb, Sr and Zn) using the same seven freshwater archetypes by Dong et al. [17]. Aggregated CFs were similar or higher (with a difference of not more than two orders of magnitude) when compared to the CFs currently used in USEtox and USES-LCA [17]. While the results suggest that the importance of taking speciation into account is mitigated and depends on the metal studied, the CFs have not yet been tested in case studies to confirm or refute the need to include speciation in LCA.

Recently, Owsianiak et al. obtained CFs including metal speciation for Cu and Ni for terrestrial ecotoxicity for 760 different non-calcareous soils by introducing accessibility and bioavailability factors calculated with empirical regressions and using terrestrial biotic ligand models (TBLM) [19]. The CFs that were obtained varied over 3 and 3.5 orders of magnitude, respectively, for Cu and Ni (2 orders of magnitude when considering a 95% confidence interval) [19]. However, they were not tested in a case study to determine the actual impact of including metal speciation on LCA results.

In a previous study [168], we obtained CFs for Zn for terrestrial ecotoxicity by integrating a BF obtained with the WHAM 6.0 geochemical speciation model based on either soluble or true solution Zn [1] and calculating an effect factor with available terrestrial ecotoxicity data [168]. Global generic CF values were also obtained by using population density as a Zn emissions proxy [168]. The results showed that including Zn speciation in CF definition can considerably reduce the terrestrial ecotoxicity CF value for Zn even when the bioavailable fraction is defined in terms of soluble Zn [168]. When using soluble Zn, CF values varied over 1.76 orders of magnitude, indicating that a single aggregated value could reasonably be used for the world, whereas, when using true solution Zn, CF values varied over 14 orders of magnitude (5.45 with a 95% confidence interval), requiring the use of 518 archetypes and 13 groups of archetypes to represent the variability [168]. The generic CF values were  $4.7 \text{ PAF} \cdot \text{m}^3 \cdot \text{d} \cdot \text{kg}^{-1}$  (PAF: potentially



affected fraction) for soluble Zn and  $1.45 \text{ PAF}\cdot\text{m}^3\cdot\text{d}\cdot\text{kg}^{-1}$  for true solution Zn, which are respectively 27 and 88 times lower than the Zn terrestrial CF in IMPACT 2002 ( $128 \text{ PAF}\cdot\text{m}^3\cdot\text{d}\cdot\text{kg}^{-1}$ ) [168]. However, it is important to test these newly obtained CF values in case studies in order to determine the real impact of integrating Zn speciation in terrestrial ecotoxicity on LCA results.

The main goal of this study is to compare the ecotoxicological impacts obtained with current CFs for total Zn and the newly calculated ones that include Zn speciation in a case study in which Zn emissions to soil are important contributors to ecotoxicological impacts.

A case study was carried out on the *market for electricity, low voltage CA-QC* ecoinvent data, which includes the emissions and energy consumption related to the production of 1 kWh from hydroelectricity as the main power source. The ecotoxicological impact scores are calculated using different case scenarios: current IMPACT 2002 CF without speciation, USEtox derived terrestrial CF without speciation, generic default CF values for the world including speciation based on soluble or true solution Zn and minimum and maximum regionalized CF values including speciation. These latter CFs were taken from Plouffe et al. [168]. The results are compared in terms of the contribution of Zn emitted to soil to the terrestrial ecotoxicity impact category and to the ecosystem quality damage category impact scores ( $\text{PDF}\cdot\text{m}^2\cdot\text{yr}$ ) (PDF: Potentially disappeared fraction of species). The contribution of the terrestrial ecotoxicity impact ( $\text{PDF}\cdot\text{m}^2\cdot\text{yr}$ ) to the ecosystem quality impact score and the rank of Zn emitted to soil were also compared for the various scenarios. Finally, a recommended procedure regarding the use of CFs including Zn speciation based on the comparison results is presented for LCA analysts to facilitate implementation in LCA practices.

## 5.7 Methods

### 5.7.1 Case study

The case study carried out as part of this project is driven by the *market for electricity, low voltage CA-QC* data found in the latest version of the ecoinvent database (version 3.1) [169]. In version 3, electricity supply (electricity markets) life cycle inventories (LCI) and life cycle impact assessments (LCIA) were updated and are available for 71 different geographic locations [169]. Since energy supply is a determining factor in LCA results, the update should help reduce

the uncertainty in worldwide LCAs [169]. To do so, annual geography and technology related to the production of electricity for the year 2008 and market datasets were considered for the 71 electricity profiles [169]. The electricity production mixes and markets consider 1 kWh of electricity as a reference product [169]. Electricity markets in version 3 represent the electricity supply mixes found in ecoinvent version 2 [169]: electricity inputs from domestic production and imports from neighbouring countries, transmission and transformation infrastructure, associated emissions, and a direct link to electricity from the market itself accounting for the losses during transmission. They include the inputs of the reference product, transport, losses, wholesaler and/or retailer activities and waste related to these activities [169, 170]. Generally, the geographic locations considered correspond to individual countries, except for larger countries such as the USA and Canada, where electricity production varies considerably from one region to another [169]. Since Canada is divided into provinces and territories [169], the data considered in this case study pertains to the province of Québec (CA-Qc), where hydropower is the main electricity production technology (around 96%) [169, 171]. Low voltages are household voltages below 1kV [169].

The case study is based on the *market for electricity, low voltage CA-QC* LCI. The data contains the results of a complete LCA based on the following function: provide electricity using production, purchase, transport and distribution. The functional unit was defined as the production, purchase, transport and distribution of 1 kWh of electricity for the province of Québec (Canada) using the year 2008 as a reference. This LCI includes the construction of the electricity network and the operation, maintenance and dismantling activities, except for the dismantling of hydroelectric power plant and dams. LCI does not take electricity consumption into account. The SIMAPRO LCA software and the IMPACT 2002+ version 2.15 methodology [43] were used in this study. The IMPACT 2002+ method was updated in 2012 to include damage indicators for acidification and eutrophication [172].

This case study was selected for the project because Zn is one of the main contributors to the ecosystem quality damage category when current methodologies (e.g. IMPACT 2002+) are used (see Figure 1 below and the results section). In fact, aluminum (Al) and Zn emitted to soil during the production of electricity purchased outside the boundaries of the province of Québec and the waste management activities (ash management) represent 55% of the impacts related to the damage category.

### 5.7.2 CF tested scenarios

Different scenarios were tested in order to determine the significance of taking speciation into account for the terrestrial ecotoxicity impact category. In this case study, only the terrestrial ecotoxicity CF value for Zn emitted to soil was modified. The first scenario, titled IMPACT\_2002, uses CF values from the IMPACT 2002 model. All the other CF values including Zn speciation were taken from Plouffe et al. (2014) [168]. The second scenario, USEtox\_mod, represents the use of USEtox-derived terrestrial CF. This scenario was chosen to verify the coherence in terms of absolute value with the USEtox version modified to generate the terrestrial CFs used by Plouffe et al. (2014) and IMPACT 2002+ before considering the influence of speciation. The third and fourth scenarios, generic\_Sol and generic\_TS, represent the cases in which generic CF values obtained using either soluble Zn or true solution Zn (free ions and ion pairs) as the bioavailable fraction and world population density as an emission proxy. This proxy was used as a weighting factor for the regionalized CFs to obtain the aggregated values. These scenarios are based on the assumption that Zn emissions are more likely to occur in densely populated areas and correspond to what an LCA analyst could do with no information on the type of soil receiving the Zn emissions or on the location of the Zn emissions. The fifth and sixth scenarios, TS\_min and TS\_max, represent the cases in which minimum and maximum CF values obtained using true solution Zn as the bioavailable fraction considering all soil types of the world were used. These scenarios make it possible to determine the global spatial variability corresponding to the use of generic CFs (i.e. it may lead to an uncertainty value for scenario 4). Finally, the seventh and eighth scenarios, QC\_TS\_min and QC\_TS\_max, represent the cases in which minimum and maximum CF values obtained with true solution Zn as the bioavailable fraction for the province of Québec province were used, in order to be coherent with the study'secoinvent data, which is regionalized and represents the market for electricity obtained with the technology used in the region. These scenarios make it possible to determine the regional spatial variability of the Québec CFs (i.e. it may lead to an uncertainty value for the impact of a Zn emission to soil in Québec that is lower than global spatial variability). The CF values were first obtained visually by looking at the world map presented in Plouffe et al. (2014), which represents the 13 archetype groups [168]. With this map, it was possible to see which groups were found in Québec and in the regions that provide electricity to Québec and then take the maximum and

minimum values associated with these groups (group E for minimum value and group H for maximum value). The CF values used in this study are presented in Tableau 5.1.

Tableau 5.1 CF values that were tested for the different scenarios

Chapitre 6	Scenario	Chapitre 7	CF value in $\text{PAF} \cdot \text{m}^3 \cdot \text{d} \cdot \text{kg}^{-1}$	Chapitre 8	Zn species considered
Chapitre 9	IMPACT_2002	Chapitre 10	1,28E+02		Total Zn
	USEtox_mod		2,92E+02		Total Zn
	generic_Sol		4,70E+00		Soluble Zn
	generic_TS		1,45E+00		True solution Zn
	TS_min		8,83E-15		True solution Zn
	TS_max		2,05E+00		True solution Zn
	QC_TS_min		1,28E-07		True solution Zn
	QC_TS_max		2,05E+00		True solution Zn

### 10.1.1 Scenario comparisons

Scenarios were compared at different levels in the cause and effect chain based on the various impact and damage scores presented in Figure 5.1.

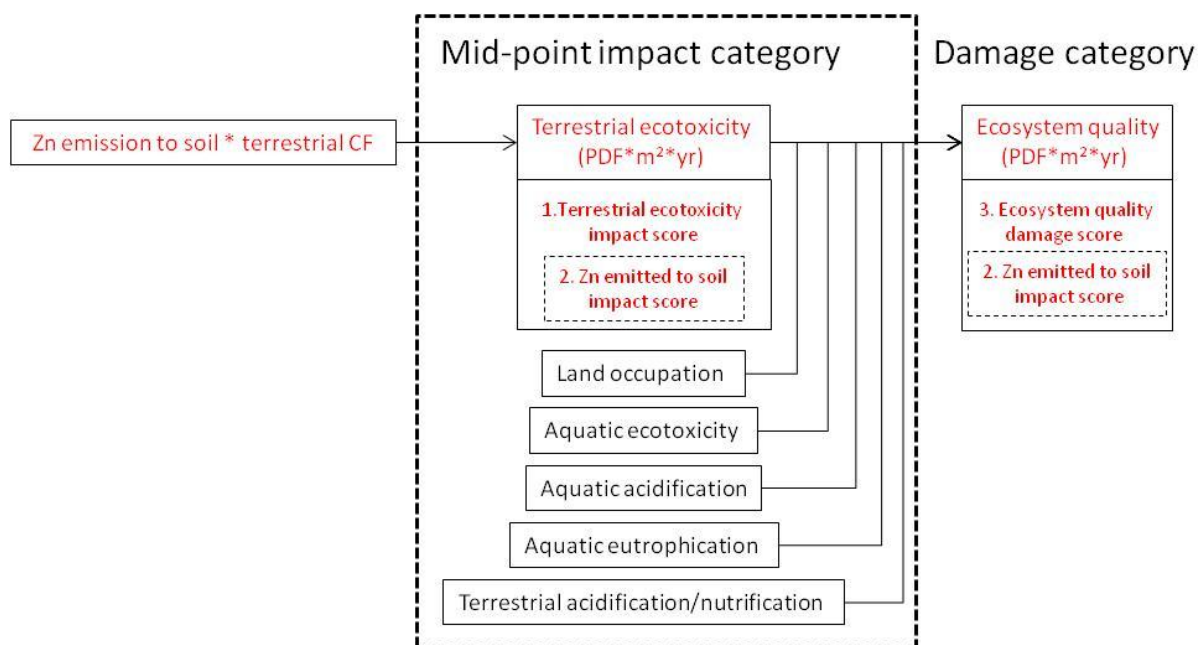


Figure 5.1 Levels of the cause and effect chain that are considered and impact and damage scores that are compared in the study

For each scenario, the **Zn emitted to soil impact score** (see no.2 in Figure 5.1) (PDF.m<sup>2</sup>.yr) and the **ratio of the Zn emitted to soil impact score (no.2) to the total terrestrial ecotoxicity impact score (no.1)** (PDF.m<sup>2</sup>.yr) were obtained in order to determine the contribution of Zn to the terrestrial ecotoxicity midpoint impact category and **the ratio of the Zn emitted to soil impact score (no.2) to the total ecosystem quality damage score (no.3)** (PDF.m<sup>2</sup>.yr) (see Figure 5.1). The latter makes it possible to analyze the contribution of Zn emitted to soil linked to the terrestrial ecotoxicity impact (no.2) and the ecosystem quality damage category (no.3). The following midpoint damage categories contribute to the damage score for ecosystem quality: aquatic ecotoxicity, terrestrial ecotoxicity, terrestrial acidification/nitrification, land occupation, aquatic acidification and aquatic eutrophication [172] (see Figure 5.1). For the second comparison, we only used the Zn emitted to soil that contributes to terrestrial ecotoxicity and not the Zn emitted to soil that contributes to all the impact categories included in the ecosystem quality damage category, since part of the Zn to soil could come from a midpoint category other than terrestrial ecotoxicity. In IMPACT 2002+, Zn also contributes to aquatic ecotoxicity and, in other LCIA methodologies such as ReCiPe, it could also contribute to marine ecotoxicity.

The **ratio of the total terrestrial ecotoxicity impact score (PDF.m<sup>2</sup>.yr) (no.1) to the total ecosystem quality damage score (no.3)** and **the rank of Zn emitted to soil among the most contributing substances to the terrestrial ecotoxicity impact score** were also compared for the different scenarios.

Based on these comparisons, a procedure for the use of CFs including Zn speciation was recommended for LCA analysts in order to facilitate implementation in LCA practices.

## 10.2 Results and discussion

### 10.2.1 Contribution of the Zn emitted to soil impact score to the terrestrial ecotoxicity impact score (PDF.m<sup>2</sup>.yr)

The Zn emitted to soil impact score (PDF.m<sup>2</sup>.yr) (no.2) contributing to the terrestrial ecotoxicity impact score and the percentage that the score represents as compared to the total terrestrial ecotoxicity impact score (calculated as the ratio of no.2 to no.1) for the different scenarios are presented in Figure 5.2.

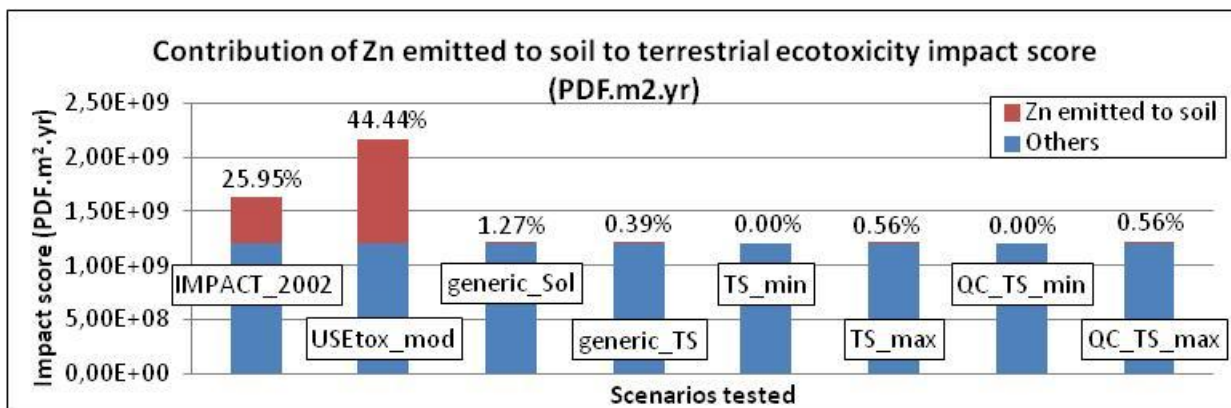


Figure 5.2 The Zn emitted to soil impact score (PDF.m<sup>2</sup>.yr) (no.2) is compared to the terrestrial ecotoxicity impact score (in PDF.m<sup>2</sup>.yr and in %) (no.1)

As illustrated in Figure 5.2, even if it is not the same, the Zn emitted to soil impact score (PDF.m<sup>2</sup>.yr) contributing to the terrestrial ecotoxicity impact category is of the same order of magnitude when using IMPACT\_2002 or USEtox\_mod, since neither take Zn speciation into account (impact score of 4.22E+8 and 9.64E+8 PDF.m<sup>2</sup>.yr, respectively, for the IMPACT\_2002 and USEtox\_mod scenarios). These scores for Zn represent about 26% and 44% of the total terrestrial ecotoxicity impact score. Zn emitted to soil is therefore a major contributor to terrestrial ecotoxicity in this case study. When using generic global CF values for the world (generic\_Sol and generic\_TS), the Zn emitted to soil impact scores contributing to terrestrial ecotoxicity are respectively 1.44 to 1.95 orders of magnitude lower than the IMPACT\_2002 score when using soluble Zn (1.55E+7 PDF.m<sup>2</sup>.yr) or true solution Zn (4.78E+6 PDF.m<sup>2</sup>.yr). This drop makes the contribution of Zn to terrestrial ecotoxicity fall to, respectively, 1.27% and 0.39% of the total terrestrial ecotoxicity score when using soluble Zn or true solution Zn. When using regionalized CFs (TS\_min and TS\_max), the Zn emitted to soil impact score varies over 14.37 orders of magnitude (between 2.91E-8 and 6.77E+6 PDF.m<sup>2</sup>.yr), which is between 1.79 and 16.16 orders of magnitude lower than the IMPACT\_2002 score for Zn emissions to soil, and the contribution to the overall terrestrial ecotoxicological impact is not higher than 0.56%. For the province of Québec (Canada), the geographical context for which the market for electricity, low voltage CA-QC data was obtained (QC\_TS\_min and QC\_TS\_max), the Zn emitted to soil impact score varies over 7.21 orders of magnitude (between 3.48E-10 and 6.77E+6 orders of magnitude), which is between 1.79 and 9 orders of magnitude lower than the IMPACT\_2002 score for Zn emissions to soil, and the contribution of Zn emitted to soil impact score to the total

terrestrial ecotoxicity impact score is 0.56% or lower. To put these results into perspective, this variation is much greater than what was found for freshwater ecotoxicity (1 to 4 orders of magnitude) by Gandhi et al. in case studies with CFs including speciation [16]. These large variations (up to 14 orders of magnitude) indicate the considerable impact that the inclusion of Zn speciation in soil could have, especially when considering the spatial variability of environmental parameters. However, even if there are large variations, including speciation always makes the contribution of Zn drop to a much lower level than in this case study when speciation is not considered.

### 10.2.2 Contribution of the terrestrial ecotoxicity impact from Zn emitted in soil to ecosystem quality damage (PDF.m<sup>2</sup>.yr)

Tableau 5.2 presents the contribution of the total terrestrial ecotoxicity impact (PDF.m<sup>2</sup>.yr) (no.1) to the total ecosystem quality damage score (PDF.m<sup>2</sup>.yr) (no.3) for the different scenarios.

Tableau 5.2 The contribution of the total terrestrial ecotoxicity score (PDF.m<sup>2</sup>.yr) to the total ecosystem quality damage score (PDF.m<sup>2</sup>.yr) is presented for the different scenarios

Scenarios	Total ecosystem quality score (PDF.m <sup>2</sup> .yr)	Total terrestrial ecotoxicity score (PDF.m <sup>2</sup> .yr)	Contribution of total terrestrial ecotoxicity score to ecosystem quality score (%)
IMPACT_2002	1.91E+09	1.63E+09	85.36%
USEtox_mod	2.45E+09	2.17E+09	88.60%
generic_Sol	1.50E+09	1.22E+09	81.39%
generic_TS	1.49E+09	1.21E+09	81.25%
TS_min	1.48E+09	1.20E+09	81.19%
TS_max	1.49E+09	1.21E+09	81.28%
QC_TS_min	1.48E+09	1.20E+09	81.19%
QC_TS_max	1.49E+09	1.21E+09	81.28%

In this case study, terrestrial ecotoxicity is the main contributor to the damage category, representing between 81 to 85% of the total damage category impact score. Also, the contribution of Zn to soil to ecosystem quality mainly stems from terrestrial ecotoxicity when compared to all the other impact categories in the damage category. In fact, the contribution of Zn to soil to ecosystem quality from midpoint categories other than terrestrial ecotoxicity is very low (around 0.03-0.04%). For this reason, in this particular case, it is important to characterize the fate and

effect of Zn in soil. Also, including Zn speciation in soil lowers the total terrestrial ecotoxicity scores by about 25 to 26% and the total ecosystem quality scores by about 21 to 22% (Figure 5.2).

The tendency observed for the terrestrial ecotoxicity midpoint impact category is also observable at the damage level, as shown in Figure 5.3, which illustrates the contribution of the Zn emitted to soil terrestrial ecotoxicity impact score (no.2) to the ecosystem quality damage score (PDF.m<sup>2</sup>.yr) (no.3).

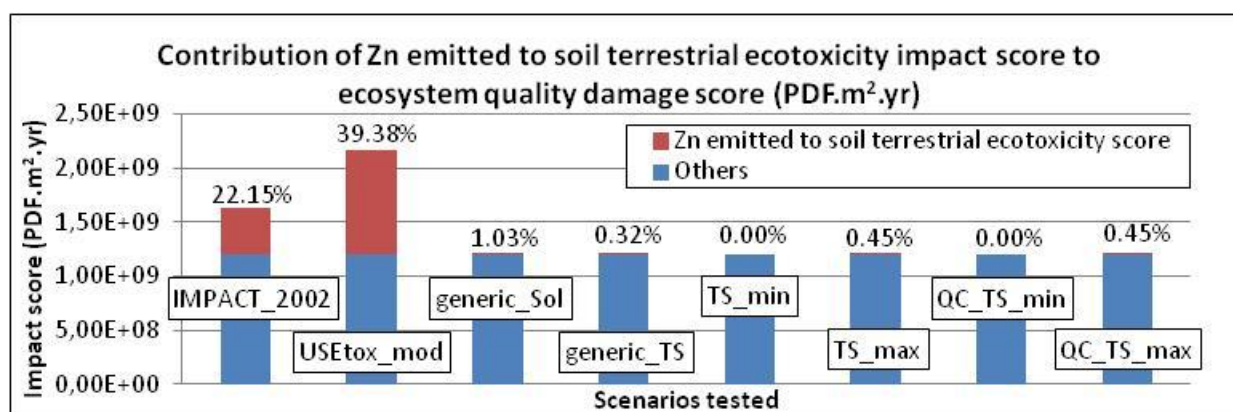


Figure 5.3 The Zn emitted to soil terrestrial ecotoxicity impact score (PDF.m<sup>2</sup>.yr) (no.2) is compared to the ecosystem quality damage score (in PDF.m<sup>2</sup>.yr and in %) (no. 3)

According to Figure 5.3, the contribution of Zn emitted to soil contributing to terrestrial ecotoxicity is about 22% and 39% of the ecosystem quality damage score when speciation is not taken into account and falls to around 1% and 0.3% when using generic global CF values that take speciation into account. Regionalization also significantly decreases the contribution.

### 10.2.3 Rank of Zn among the substance that contribute the most to terrestrial ecotoxicity

Tableau 5.3 presents the rank of Zn emitted to soil among the substances that contribute the most to the terrestrial ecotoxicity impact score for the various scenarios (see the supporting information for the ranking of the 263 most contributing substances, annexe C).



Tableau 5.3 The rank of Zn emitted to soil that contribute to the terrestrial ecotoxicity impact score

Scenarios	Rank of Zn emitted to soil for terrestrial ecotoxicity
IMPACT_2002	2
USEtox_mod	1
generic_Sol	9
generic_TS	13
TS_min	255
TS_max	12
QC_TS_min	110
QC_TS_max	12

Tableau 5.3 indicates that the Zn emitted to soil ranks second (after Al emitted to soil) when using the current IMPACT 2002 model, which does not take speciation into account. Zinc emitted to soil ranks first when using a USEtox-derived terrestrial ecotoxicity CF—the other option that does not consider speciation. When including Zn speciation in soil, Zn emitted to soil falls to the 9<sup>th</sup> and 13<sup>th</sup> place when using a generic global CF value with soluble Zn and true solution Zn (generic\_Sol and generic\_TS). The ranking of Zn emitted to soil varies between the 12<sup>th</sup> and the 255<sup>th</sup> position when using regionalized CFs for the world based on true solution Zn (TS\_min and TS\_max scenarios). When considering the geographic context of the *market for electricity, low voltage, CA-QC* data (QC\_TS\_min, QC\_TS\_max), the rank of Zn emitted to soil varies between the 12<sup>th</sup> and the 110<sup>th</sup> position, illustrating the considerable influence of Zn speciation on the terrestrial ecotoxicity impact scores in this case study.

#### 10.2.4 Recommendations for LCA users

Based on the results of this case study, we recommend the use of CFs including speciation, especially when metals are the main contributors to terrestrial ecotoxicity. The use of generic global values is recommended first since they do not require additional information on soil properties. They would be easy to use and implement by LCA users and would be more adequate than current CF values. Also, if there is no information on soil properties or the location of the Zn emissions, we recommend testing the maximum and minimum CF values in order to see what could cause this lack of detailed information. Here, not taking spatial variability into account can induce a variability of 14 orders of magnitude for the terrestrial ecotoxicity impact

scores, making Zn's position vary between the 12<sup>th</sup> and the 255<sup>th</sup> position. Whenever possible, including spatial variability is recommended, especially if metals are major contributors to ecotoxicological impacts.

### 10.3 Conclusion

The objective of this study was to determine the influence of including terrestrial Zn speciation when defining CFs on the LCA results. The results presented here reveal that integrating Zn speciation and the spatial variability of environmental parameters into CF definition can have a considerable impact on the terrestrial ecotoxicity and ecosystem quality impact scores and the ranking of Zn among the most contributing substances, especially in LCAs for which Zn is among the major contributors to terrestrial ecotoxicity. For this case study, even when using a generic CF value for the world based on soluble Zn, the contribution of Zn drops from 25.95% to 1.27% of the total terrestrial ecotoxicity impact score, falling from the 2<sup>nd</sup> to the 9<sup>th</sup> position. Also, by solely including Zn speciation for terrestrial ecotoxicity, the total terrestrial ecotoxicity and total ecosystem quality scores are considerably reduced.

But what would the terrestrial ecotoxicity and total ecosystem quality scores be if the speciation of all metals was taken into account? In this case study, the contribution of metals represents over 99% of the terrestrial ecotoxicity impact score (PDF.m<sup>2</sup>.yr) for all scenarios, and the contribution of metals emitted to soil is between 56.20% (TS\_min and QC\_TS\_min) and 75.67% (USEtox\_mod), indicating that integrating the speciation of all metals could considerably alter the results. Further development is required to generalize the work that has already been carried out on Zn to other metals, highlighting the significance and feasibility of accounting for metal speciation in soil in an LCA context.

## **CHAPITRE 11 DISCUSSION GENERALE: PRISE EN COMPTE DES METAUX EN ACV ET OPERATIONALISATION DES FC REGIONALISES**

Ce chapitre présente une discussion sur les avancées réalisées dans le cadre de projet pour prendre en compte les particularités des métaux en ACV, les forces et les limites de la méthode utilisée ainsi que les recommandations pour l'opérationnalisation des FC obtenus et pour l'extension de la méthode aux autres métaux.

### **11.1 Prise en compte des métaux en ACV : avancées réalisées et limites de la méthode**

Le consensus atteint par le groupe de travail de l'initiative sur le cycle de vie du PNUE et de la SETAC réuni à Clearwater visait à développer des FC pour les métaux pour l'écotoxicité aquatique en ACV en intégrant notamment la fraction dissoute des métaux dans la modélisation de leur devenir, en ajoutant un FB dans le calcul des FC et en regroupant les systèmes aquatiques d'eau douce en archétypes de propriétés similaires [13]. La méthode suggérée pour calculer le FB était de considérer la fraction biodisponible comme étant la concentration vraiment dissoute (incluant les ions libres et les paires d'ions) et de la calculer avec l'aide d'un modèle géochimique de spéciation, et plus précisément, en utilisant le modèle WHAM 6.0, car il est le plus couramment utilisé de sa catégorie et qu'il permet de prendre en compte la complexité de la MO [13]. Ces recommandations ont été suivies par Gandhi *et al.* et Dong *et al.* [14, 16, 17] (voir section 1.5.1).

Le groupe de travail proposait également d'appliquer ce cadre méthodologique aux autres compartiments des méthodes ACV, notamment les sols. Or, les sols étant des milieux plus hétérogènes [10, 23], cette application ne se fait pas forcément aussi directement. C'est d'ailleurs pour cette raison qu'Owsianiak *et al.* ont opté pour l'utilisation de relations empiriques [19] (voir section 1.5.2). Cependant, cette méthode n'est pas toujours applicable à grande échelle ni facile à généraliser [20].

L'approche proposée à Clearwater méritait toutefois d'être testée pour les sols afin de voir dans quelle mesure elle était applicable. Les avantages, si ceci est avéré, seraient d'avoir une

méthode cohérente pour toutes les sous-catégories d'impacts écotoxicologiques, ce qui simplifie sa mise en œuvre en ACV, et aussi ce qui fait en sorte que sa généralisation sera plus aisée aux autres métaux, les modèles de spéciation permettant de modéliser avec plus de cohérence que les relations empiriques la majorité des métaux les plus courants.

Ce processus a été réalisé en plusieurs étapes. Les modèles géochimiques de spéciation disponibles sont développés pour les systèmes aquatiques ou pour la solution du sol et requièrent des informations détaillées sur la physicochimie des eaux [78, 102, 104, 107-114]. Il n'était pas certain qu'appliqués à un contexte global, où les données physicochimiques sont limitées à ce qui est présent dans les bases de données mondiales des sols, les modèles géochimiques permettent de modéliser adéquatement la spéciation du Zn dans les sols. Cependant, avant de prendre la décision de modifier en profondeur ou de créer un modèle uniquement pour les sols, il était nécessaire de vérifier dans quelle mesure les modèles actuels pouvaient être employés. Ceci permettrait d'accélérer la mise en œuvre d'une solution permettant de remédier à un problème concret et non sans conséquence en ACV : la domination des métaux en écotoxicité terrestre, problème soulevé par Pizzol *et al.* [9].

Le modèle WHAM 6.0 a été choisi non seulement parce qu'il est couramment utilisé, qu'il permet de prendre en compte la complexité de la MO, mais aussi parce qu'il permet d'entrer quantitativement les phases particulières sur lesquels les métaux seront susceptibles de se lier [132]. Ceci est un point important à considérer lorsque l'on modélise la spéciation dans les sols et non pas seulement dans la solution de sol.

Étant donné que le modèle géochimique WHAM 6.0 a été utilisé hors de son contexte habituel, les résultats de modélisation ont été confrontés à des données de terrain. Ceci n'est pas systématiquement effectué dans les études globales (Gandhi *et al.*, Dong *et al.*, Owsianiak *et al.* ne semblent pas avoir effectuées de vérification de la validité de leurs modèles avec des données de terrain), mais il a été jugé que cette validation était une étape importante pour déterminer les incertitudes associées à l'utilisation d'un modèle géochimique non spécifiquement conçu pour les sols. Les résultats de cette étape présentés dans le premier manuscrit (se référer au chapitre 3) ont montré que malgré certaines hypothèses assez grossières posées pour adapter les propriétés des sols afin qu'elles correspondent aux paramètres d'entrée du modèle WHAM 6.0, les prédictions du modèle étaient satisfaisantes pour une grande variété de sols lorsque le Zn soluble était

considéré comme étant la fraction biodisponible (93% des échantillons de sols ayant des prédictions à moins de deux ordres de grandeur des mesures de terrain dont 41% étant dans le même ordre de grandeur). Étant donné les incertitudes reliées aux mesures expérimentales et à la modélisation, ces différences sont jugées acceptables pour des applications ACV. De plus, les FB en termes de Zn soluble d'échelonnaient sur 8 ordres de grandeur pour les données expérimentales. Un écart de 2 ordres de grandeur n'est pas démesuré et permettrait au moins de déceler les principales tendances. L'écart de 1 ordre de grandeur pour 41% des échantillons correspond à ce qui a été obtenu par Groenenberg *et al.* dans son étude portant sur la comparaison entre l'utilisation de modèles multisurfaces (celui développé par Dijkstra *et al.* [173]) et de relations empiriques pour déterminer la solubilité des métaux dans une grande variété de sols [20]. Pour les FB en termes de Zn vraiment dissout, 50% ont des prédictions inférieures à 2 ordres de grandeur dont 12,5% étant dans le même ordre de grandeur. Pour 13 sols, les différences étaient très élevées, indiquant possiblement un biais dans le modèle ou les choix de paramétrage pour les sols ayant une très forte concentration en MO et une forte CEC.

Le processus de validation n'est pas exhaustif, étant donné le manque de données de terrain disponibles, principalement pour le Zn vraiment dissout. Il couvre néanmoins 25% des unités de sol du monde (voir chapitre 3), réparti sur l'ensemble des continents, pour le Zn soluble, mais seulement 2,9% pour le Zn labile. De plus, certaines hypothèses sont très grossières et ne s'appliquent pas nécessairement à tous les sols. En effet, dans le cadre de ce projet, les mêmes hypothèses pour transformer les propriétés des sols en paramètres d'entrée du modèle ont été appliquées à tous les types de sols, étant donné le peu de données disponibles à grande échelle. Ainsi, la même proportion de cations a été choisie pour représenter la CEC tout comme la même proportion d'acides humiques et fulviques a été choisie pour représenter la MO pour l'ensemble des sols du monde (voir annexe A pour plus de détails sur la conversion des données de sol), alors que ces proportions peuvent varier considérablement d'un type de sol à l'autre [157]. Une analyse de sensibilité sommaire (modifier la proportion des cations dans la CEC, celle des acides humiques et fulviques dans la MO et le type d'oxydes) a toutefois été réalisée dans le cadre du premier manuscrit à ce propos et les hypothèses retenues étaient celle qui fournissaient les meilleures estimations parmi les scénarios étudiés. Cependant, si des données plus précises devenaient disponibles pour l'ensemble des sols du monde, il serait intéressant de les intégrer à la démarche ou du moins de voir leur impact sur les résultats. Dans ce projet, la cohérence entre les

sols du monde a été préférée à une démarche plus hétérogène en termes de précision puisque ceci reste plus en phase avec l'ACV qui considère des émissions à travers le monde. L'objectif de ce projet était certes de tester la capacité des modèles actuels à prédire la spéciation du Zn dans les sols, mais surtout de produire des FC régionalisés qui incluent la spéciation, qui ont été testés dans une étude de cas et qui sont directement applicables à l'ACV, quitte à poser certaines hypothèses plus grossières pour la transformation des paramètres de sols.

Dans le cadre de ce projet, la biodisponibilité du Zn a été estimée de deux manières. D'une part, la biodisponibilité a été associée au Zn soluble, puisque une grande majorité des données de terrain étaient disponibles sous cette forme et au Zn vraiment dissout, pour lequel moins de données de terrain sont disponibles pour valider l'approche, mais qui est toutefois la fraction proposée par le consensus de Clearwater pour représenter la biodisponibilité [13]. La fraction vraiment dissoute semble raisonnable pour le Zn dans les eaux douces, où l'ion libre est l'espèce dominante à des pH inférieurs à 7 et où les espèces principales à des pH supérieurs (pH 9) sont  $\text{ZnOH}^+$ ,  $\text{ZnCO}_3$  and  $\text{Zn}^{2+}$  [70]. Pour les sols, l'ion libre est également l'espèce dominante pour des pH inférieurs à 7 [58, 70, 71, 73], alors que la présence de  $\text{ZnOH}^+$  augmente au fur et à mesure que le pH augmente [58, 75]. Étant donné que les plantes absorbent généralement le Zn sous forme d'ion libre et que  $\text{ZnOH}^+$  est aussi important pour l'adsorption et l'absorption du Zn par les plantes [58, 78], le choix de représenter la fraction biodisponible de Zn par la fraction vraiment dissoute semble raisonnable. La fraction soluble, quant à elle, est certes moins précise, mais elle reste toutefois pertinente, puisque les métaux sont généralement absorbés par les organismes vivants via la solution du sol [52]. Les deux options ont été conservées, puisqu'elles permettent d'obtenir des informations différentes. En effet, en utilisant la fraction soluble, on obtient une variabilité spatiale plus faible (environ 6 ordres de grandeur pour FB et 1,76 ordre de grandeur pour FC), mais les prédictions du modèle WHAM 6.0 sont plus fiables (25% des unités de sol du monde dont la majorité ont un écart de moins de 2 ordres de grandeur entre valeurs de terrain et prédites et dont 41% est dans le même ordre de grandeur). La fraction vraiment dissoute semble, quant à elle, prendre en compte une plus grande variabilité (18 ordres de grandeur pour FB et 14 pour FC dont 5,45 avec un intervalle de confiance de 95%). Elle est cependant moins documentée, puisque les données de terrain utilisées dans le cadre de ce projet ne couvraient que 2,9% des unités de sol. De plus, certains types de sols semblaient être moins bien modélisés par

le modèle WHAM 6.0 avec le paramétrage choisi, notamment ceux ayant un contenu en MO et une CEC élevés.

Ce projet a permis également de soulever certaines lacunes concernant l'écotoxicité terrestre du Zn (se référer au deuxième manuscrit, chapitre 4). Les dernières années, avec le développement des modèles BLM et TBLM, les données écotoxicologiques ont permis d'être mieux adaptées aux interactions métaux-organismes vivants et d'obtenir des valeurs de  $EC_{50}$  plus appropriées [85, 112]. Cependant, les modèles TBLM couvrant trois phyla (comme requis par les méthodes ACV) ne sont disponibles que pour le Cu et le Ni. Il fallait donc trouver une autre méthode pour obtenir les FE pour le Zn. Contrairement à ce qui a été proposé par Gandhi *et al.* et Christiansen *et al.* pour l'écotoxicité aquatique, à savoir utiliser un modèle géochimique pour convertir les données écotoxicologiques en termes de concentration biodisponible pour assurer la cohérence entre FB et FE [14, 18], il n'est pas possible d'utiliser de modèle géochimique en écotoxicité terrestre pour le Zn étant donné qu'à ce jour, la plupart des sols utilisés pour développer des données écotoxicologiques ne sont pas caractérisés ou du moins les propriétés des sols ne sont pas disponibles dans les articles documentant ces tests écotoxicologiques. Seule une partie des données écotoxicologiques répertorient le type de concentration de Zn utilisée pour obtenir la donnée écotoxicologique (ex. Zn total, Zn soluble, Zn labile) et le pH et la teneur en MO sont souvent les seules informations disponibles sur les sols ayant été utilisés dans les tests écotoxicologiques. Cependant, comme montré dans le deuxième manuscrit, pour les données écotoxicologiques, le type de concentration de Zn utilisé semble avoir une plus grande influence sur les données écotoxicologiques que les propriétés des sols à l'étude. Ainsi, dans cette étude, seule une valeur pour chaque type de concentration de Zn (soit une pour le Zn soluble et une pour le Zn vraiment dissout) a été appliquée pour l'ensemble des sols du monde.

Le consensus de Clearwater suggérait de prendre en compte la variabilité spatiale de la physicochimie des eaux douces par la création d'archétypes de mêmes propriétés [13]. Gandhi *et al.* ont par ailleurs sélectionné trois propriétés clés influençant la spéciation des métaux dans les eaux douces (pH, dureté et carbone organique dissout) et ont créés des archétypes d'eaux douces en fractionnant l'étendue de ces propriétés en trois sous-groupes par propriété (faible, modéré et élevé) [14]. Des valeurs médianes ont été associées pour chaque propriété et pour chaque archétype. Ce sont ces valeurs médianes qui ont servi de paramètres d'entrée pour le modèle WHAM 6.0 pour déterminer les FB et par la suite les FC [14]. Dans le cadre de ce projet, la

méthode a été légèrement différente. Cinq propriétés, à savoir, la texture du sol, le pH, la CEC et les teneurs en MO et carbonates ont été sélectionnées. Ces propriétés ont été choisies non seulement parce qu'elles étaient réputées comme étant celles qui influençaient la spéciation du Zn dans les sols, mais aussi parce qu'elles étaient présentes dans les bases de données mondiales des sols. L'influence de ces propriétés sur la spéciation du Zn a également été confirmée par l'utilisation de régressions linéaires (se référer au premier manuscrit, chapitre 3). Afin de définir les sous-catégories, il a été décidé de prendre des seuils adaptés à la caractérisation des sols et utilisés dans la littérature pour définir les types de sols (se référer à l'annexe A pour plus de détails sur ces seuils). Cette approche a été préférée à une approche de type « clustering » puisqu'elle conserve un lien avec les propriétés de sols, en cherchant à regrouper les sols de propriétés similaires et non pas en cherchant à regrouper les résultats similaires. Ceci a mené d'abord à 231 archétypes (se référer au chapitre 3 et à l'annexe A). Au lieu de modéliser uniquement les valeurs médianes pour chacun des archétypes créés comme Gandhi *et al.*, la spéciation du Zn a été obtenue pour chacun des 5213 échantillons de sols. Ces échantillons ont ensuite été regroupés dans les 231 archétypes créés. Ceci a été fait afin de vérifier que le choix des archétypes et des critères pour créer les sous-catégories permettait bien de représenter la variabilité des FB et des FC. Cette vérification n'aurait pas été possible en utilisant directement les valeurs médianes par archétype. Ainsi, on a pu modifier la définition des sous-catégories (se référer au deuxième manuscrit, chapitre 4 et annexe B) et créer 518 archétypes qui permettaient de regrouper les sols de manière plus cohérente. Des groupes d'archétypes ont ensuite été créés et des valeurs génériques ont été calculées afin de réduire le nombre de FC potentiels afin qu'ils soient plus faciles à utiliser en ACV tout en conservant l'intégralité de l'information quand à la variabilité spatiale.

Il est important de noter que ce projet ne considère pas dans la modélisation de l'effet que le Zn est un métal essentiel ni la séquestration définitive des métaux (voir section 1.4). De plus, il ne prend pas en compte le facteur temporel en ACV, qui est un élément important pour les métaux, puisqu'ils ne sont pas biodégradables et que par conséquent, ils sont toujours présents dans les différents horizons de temps considérés en ACV. Aussi, ce projet ne tient pas compte des cinétiques de réaction. Il serait peut-être intéressant d'effectuer une étude de cas qui permettrait de comparer les cinétiques de réaction se produisant dans les sols et les échelles de temps utilisées en ACV pour la modélisation du devenir.



Les concentrations naturelles ont toutefois été considérées dans ce projet. De plus, et surtout, ce projet a permis d'inclure la spéciation, qui est cruciale dans la modélisation du devenir du Zn, puisqu'elle gouverne sa biodisponibilité et donc sa toxicité.

Aussi, c'est le premier projet qui fournit des FC régionalisés qui sont directement applicables dans les méthodes ACV et qui ont été testés dans une étude de cas pour les métaux en écotoxicité terrestre. En effet, Owsianiak *et al.* avaient obtenus des FC pour 760 sols mais sans tenter de les regrouper pour faciliter leur opérationnalisation et sans qu'aucune tentative de validation ne soit effectuée pour confronter les résultats des relations empiriques.

## 11.2 Recommandations pour l'opérationnalisation des FC

Ce projet a permis d'obtenir des FC régionalisés qui incluent la spéciation. Ces facteurs ont été testés dans une étude de cas où le Zn était l'un des principaux contributeurs pour l'écotoxicité terrestre (se référer au troisième manuscrit, chapitre 5). C'est la première fois que des FC incluant la spéciation de Zn dans les sols sont intégrés dans une étude de cas. L'étude de cas portant sur la donnée ecoinvent *market for electricity, low voltage, CA-QC* a permis de mettre en valeur l'importance d'intégrer la spéciation du Zn en écotoxicité terrestre pour plusieurs points. Même en utilisant les valeurs génériques, la contribution du Zn chute de 26% à 1,27 ou 0,39% selon qu'on utilise le Zn soluble ou le Zn vraiment dissout. Non seulement le score d'impact pour l'écotoxicité terrestre du Zn est réduit de 1,44 à 14,37 ordres de grandeur par rapport à celui du modèle IMPACT 2002, mais les scores totaux pour l'écotoxicité terrestre et pour la qualité des écosystèmes sont aussi réduits de 25-26% et 21-22%. Finalement, le rang du Zn passe du 2<sup>e</sup> rang à un rang se situant entre la 9<sup>e</sup> et la 255<sup>e</sup> position en fonction du FC utilisé. Certes, la plupart des principaux contributeurs de cette étude de cas sont des métaux et la spéciation n'a été incluse que pour le Zn, ces résultats montrent cependant qu'il est important de prendre en compte la spéciation du Zn dans les sols pour l'écotoxicité terrestre. Il est vrai que l'incertitude acceptable pour l'écotoxicité est de 2 ordres de grandeur [33, 44] et qu'en utilisant le FC générique pour le Zn soluble le score d'impact obtenu est seulement 1,44 ordres de grandeur plus faible. Il est toutefois important de considérer la spéciation car les scores totaux pour l'écotoxicité terrestre et la qualité des écosystèmes ainsi que le rang du Zn sont modifiés.

Ainsi, en fonction des résultats obtenus dans ce projet, il est recommandé d'utiliser les FC qui incluent la spéciation, surtout lorsque les métaux sont les principaux contributeurs à l'écotoxicité terrestre.

La marche à suivre pour les analystes désirant intégrer les résultats de ce projet est la suivante :

1. Lorsqu'il n'est pas possible de savoir dans quel type de sol les émissions de Zn ont lieu et lorsqu'aucune information sur le lieu d'émission n'est disponible, utiliser les valeurs génériques. Il est recommandé également d'utiliser les valeurs minimale et maximale des FC en termes de Zn vraiment dissout. Ceci permettra de voir l'influence que peut avoir un lieu d'émission inconnu sur les résultats et de déterminer la variabilité associée à ce manque d'information (et ainsi de documenter la variabilité spatiale).
2. Si des informations sur le lieu d'émission sont disponibles mais que les types de sols sont inconnus, se référer à la carte des groupes d'archétypes (voir la figure 4.5 dans le deuxième manuscrit, chapitre 4). Déterminer pour la zone géographique les groupes d'archétypes qui sont représentés. Associer les valeurs minimale et maximale de FC et tester ces valeurs. Cette option a été testée dans l'étude de cas (QC\_TS\_min et QC\_TS\_max). Ceci permettra de réduire la variabilité spatiale et d'obtenir un écart plus adapté à l'étude.
3. Si des informations sur le type de sols sont disponibles, choisir les FC correspondant aux archétypes et prendre la valeur médiane du FC. Il peut également être intéressant de tester les valeurs minimale et maximale de FC associées à cet archétype.
4. Il est important de tester les FC obtenus avec le Zn soluble et le Zn vraiment dissout.

### **11.3 Recommandations pour étendre la méthode aux autres métaux**

Ce projet a permis d'établir les bases d'une méthode permettant d'intégrer la spéciation des métaux en écotoxicité terrestre en suivant les recommandations du consensus de Clearwater et en restant cohérent avec les travaux en écotoxicité aquatique.

Tout comme Dong *et al.* ont élargi et uniformisé la méthode développée par Gandhi *et al.* à d'autres métaux [14-17], la prochaine étape de ce projet sera de voir dans quelle mesure cette méthode s'applique à d'autres métaux que le Zn.

Pendant le cours de ce projet, une nouvelle version du modèle WHAM, WHAM 7.0, a été développée et est maintenant disponible [106]. Dans cette version, le modèle de fixation des métaux sur la MO a été mis à jour et la précipitation des hydroxydes de Fe(III) et de Al(III) est prise en compte [106]. Il serait intéressant de voir dans quelle mesure son utilisation modifie les résultats pour le Zn. Cette version devrait également être utilisée lors de l'extension de la méthode aux autres métaux. Il sera également important de vérifier si les propriétés sélectionnées pour le Zn sont aussi celles qui influencent la spéciation des autres métaux et si les archétypes définis pour le Zn sont également appropriés pour d'autres métaux.

La première étape serait de choisir les métaux cationiques principaux pour lesquels des données de terrain sont disponibles afin de faciliter la validation de la méthode. Parmi ces métaux, il serait intéressant de commencer par le Ni et le Cu. Premièrement, ce sont des métaux dont la spéciation est assez bien documentée dans la littérature. De plus, ce sont des métaux pour lesquels Gandhi *et al.* et Dong *et al.* ont obtenus des FC pour l'écotoxicité aquatique [14, 17] et pour lesquels Owsianiak *et al.* ont déterminé des FC pour l'écotoxicité terrestre [19]. Ceci permettrait de comparer les deux approches. De plus, des modèles TBLM sont disponibles pour ces deux métaux. Ceci permettrait de voir l'écart entre FE obtenus avec les modèles TBLM et ceux obtenus en utilisant les estimations faites dans le cadre de ce projet. Ceci permettra de quantifier l'incertitude associée au manque de données écotoxicologiques plus représentatives pour les métaux pour lesquels il n'existe pas de modèle TBLM. Aussi, dans l'étude de cas effectuée, ces métaux se trouvaient également parmi les principaux contributeurs (6<sup>e</sup> rang pour le Cu et 12<sup>e</sup> rang pour le Ni avec le modèle actuel IMPACT 2002). Selon l'analyse de Pizzol *et al.*, le Cu fait partie des principaux contributeurs, alors que pour le Ni, tout comme le Zn, les résultats sont contradictoires entre les méthodes [9]. Par la suite, la méthode pourrait être appliquée aux autres métaux cationiques, notamment Cd, Co, Cr et Pb, puis aux autres métaux. WHAM 7.0 permet de modéliser la spéciation pour Be, Mg, Al, Ca, Sc, VO, Cr(III), Mn, Fe(II), Fe(III), Co, Ni, Cu, Zn, Pd(II), Sr, Y, Ag, Cd, Sn(II), Ba, La, Ce, Pr, Nd, Sm, Eu, Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm, Yb, Lu, Hg, CH<sub>3</sub>Hg, Pb, Th, U(IV), UO<sub>2</sub>, NpO<sub>2</sub>, Pu(IV), PuO<sub>2</sub>, Am et Cm [106].

Cependant, il faut bien garder en tête que chaque métal a des particularités différentes et qu'il est nécessaire de valider cette approche avec des données expérimentales pour chaque métal également. Le modèle WHAM permet toutefois de rester cohérent entre les métaux, ce qui ne serait pas autant le cas en utilisant des relations empiriques.

Finalement, lorsque plus de données de terrain seront disponibles pour augmenter l'étendue de la validation ou pour améliorer la précision des données entrées dans WHAM, de même que lorsque des modèles TBLM ou des données écotoxicologiques seront disponibles pour d'autres métaux, il sera important de vérifier dans quelles mesures elles permettent d'améliorer le processus, afin d'obtenir des FC qui permettent d'inclure les particularités des métaux nécessaires pour bien représenter les impacts écotoxicologiques qu'ils sont susceptibles de causer, tout en restant gérable dans un contexte global comme l'ACV.

## CONCLUSION

Cette thèse a permis non seulement d'obtenir des FC régionalisés pour le Zn pour l'écotoxicité terrestre qui incluent la spéciation et qui sont directement applicables dans les méthodes ACV actuelles, mais elle a permis de dégager, par l'entremise d'une étude de cas, l'importance d'intégrer cette spéciation en ACV. Cette thèse s'appuyait sur l'hypothèse de recherche suivante : *L'intégration de la spéciation du Zn dans la définition du FC pour l'écotoxicité terrestre permet de départager deux scénarios pour lesquels le Zn est parmi les principaux contributeurs aux impacts écotoxiques et qui ne sont pas différenciables avec les modèles actuels utilisés en ACV (qui n'intègrent pas la spéciation), l'inclusion de la spéciation se faisant par l'intégration d'un FB calculé avec un modèle de spéciation et par la création d'archétypes de sols.*

Les résultats obtenus dans l'étude de cas montrent tendent à valider cette hypothèse. En effet, en prenant les FC calculés en intégrant un FB défini en termes de Zn vraiment dissout obtenu par le modèle WHAM 6.0 pour différents archétypes de sols, on constate que le Zn peut passer du 12<sup>e</sup> au 255<sup>e</sup> rang selon les archétypes de sols, son score d'impact pour l'écotoxicité terrestre pouvant s'échelonner sur 14 ordres de grandeur. Il est donc probable que les conclusions d'une même étude changent potentiellement selon le contexte d'émission du Zn au sol.

### 11.4 Contributions scientifiques

Actuellement, la spéciation des métaux n'est pas prise en compte en ACV. De plus, la variabilité géographique des FC des métaux n'est pas quantifiée. Ceci empêche de bien évaluer les impacts sur les écosystèmes terrestres et décredibilise les résultats des ACV, notamment celles où les grands émetteurs de métaux sont impliqués. Les travaux effectués dans le cadre de ce projet ont permis de réaliser des avancées majeures dans la prise en compte des particularités des métaux en ACV. Bien qu'il reste encore de nombreux points à élucider, ce projet a montré plusieurs points intéressants.

En bref, cette thèse a permis de

- Fournir pour la première fois des FC régionalisés qui tiennent compte de la spéciation du Zn dans les sols pour l'écotoxicité terrestre et qui ont été testés dans une étude de cas
- Estimer la fraction biodisponible et obtenir un résultat dans le même ordre de grandeur que des données de terrain en utilisant un modèle géochimique de spéciation avec des données d'entrées très sommaires mais largement disponibles.
- Démontrer que l'utilisation de modèle géochimique permet d'obtenir des meilleures prédictions en termes de valeur et de rang que l'utilisation de relations empiriques
- Proposer une méthode potentiellement généralisable pour 46 métaux et terres rares
- Tester l'applicabilité de l'approche par archétype pour les sols
- Démontrer qu'en utilisant 5 propriétés de sols, il est possible d'obtenir un nombre gérable d'archétypes pour le Zn.
- Démontrer que si la biodisponibilité est définie en termes de Zn soluble, une valeur générique de FC peut être utilisée pour l'ensemble des sols du monde
- Démontrer que si la biodisponibilité est définie en termes de Zn vraiment dissout, la variabilité spatiale des FC peut être de 14 ordres de grandeur (5,45 en prenant un intervalle de confiance de 95%)
- Démontrer qu'intégrer la spéciation du Zn dans les sols influence les scores d'impact pour l'écotoxicité terrestre et la qualité des écosystèmes, ainsi que le rang du Zn parmi les plus grands contributeurs

De plus, bien que développé dans le but de l'intégrer à l'ACV, la création d'archétypes de sols en fonction des propriétés influentes pour la spéciation du Zn, ainsi que l'utilisation de modèle géochimique pour les sols peuvent s'appliquer à d'autres méthodes d'évaluation environnementale ainsi qu'en science des sols.

## **11.5 Contributions pratiques**

Cette thèse a permis de :

- Fournir des FC pour l'écotoxicité terrestre qui incluent la spéciation du Zn et qui sont validés avec des données de terrain et testés dans une étude de cas et ce, selon plusieurs niveaux d'agrégation permettant de combiner précision, pertinence et disponibilité des données
- Fournir une marche à suivre pour l'opérationnalisation de ces FC pour faciliter leur utilisation par les analystes ACV
- Fournir un cadre méthodologique facilement transposable aux autres métaux, le modèle WHAM pouvant être utilisé pour 46 métaux et terres rares, contrairement aux relations empiriques qui requièrent des données expérimentales pour les établir
- Améliorer la crédibilité de l'ACV en ce qui a trait aux métaux et faciliter l'implantation de stratégies de gestion environnementale chez les entreprises, notamment chez les grands émetteurs de métaux.

De manière générale, cette thèse a permis non seulement d'obtenir des FC régionalisés incluant la spéciation du Zn pour l'écotoxicité terrestre qui sont directement applicables dans les méthodes ACV actuelles, mais elle a montré qu'il est possible d'utiliser les modèles géochimiques de spéciation à grande échelle pour les sols. La méthode proposée serait facilement généralisable aux autres métaux. Ce projet a également montré à quel point l'inclusion de la spéciation dans les FC des métaux en ACV pour l'écotoxicité terrestre peut avoir une influence considérable sur les scores d'impacts des ACV. Ces résultats permettront d'améliorer grandement la crédibilité de l'ACV en ce qui a trait aux métaux, ce qui aura une portée majeure dans le domaine de l'environnement, l'ACV étant une mesure de plus en plus préconisée dans les directives environnementales et dans les entreprises à l'échelle internationale.

## BIBLIOGRAPHIE

- [1] G. Plouffe, C. Bulle, and L. Deschênes, "Assessing the variability of the bioavailable fraction of zinc at the global scale using geochemical modeling and soil archetypes," *International Journal of Life Cycle Assessment*, p. 14, Published online January 8th 2015 2015.
- [2] D. Caussy, M. Gochfeld, E. Gurzau, C. Neagu, and H. Ruedel, "Lessons from case studies of metals:investigating exposure, bioavailability, and risk," *Ecotoxicology and Environmental Safety*, pp. 45-51, 2003.
- [3] J. J. D'Amore, S. R. Al-Abed, K. G. Scheckel, and J. A. Ryan, "Methods for Speciation of Metals in Soils: A Review," *Journal of Environmental Quality*, vol. 34, pp. 1707-1745, Sept/Oct 2005 2005.
- [4] N. T. Basta, J. A. Ryan, and R. L. Chaney, "Trace Element Chemistry in Residual-Treated Soil: Key Concepts and Metal Bioavailability," *Journal of Environmental Quality*, vol. 34, pp. 49-63, 2005.
- [5] M. C. Reiley, "Science, policy, and trends of metals risk assessment at EPA: How understanding metals bioavailability has changed metals risk assessment at US EPA," *Aquatic Toxicology*, pp. 292-298, 2007.
- [6] A. Fairbrother, R. Wenstel, K. Sappington, and W. Wood, "Framework for Metals Risk Assessment," *Ecotoxicology and Environmental Safety*, pp. 145-227, 2007.
- [7] S. Sauvé, W. Hendershot, and H. E. Allen, "Solid-Solution Partitioning of Metals in Contaminated Soils: Dependence on pH, Total Metal Burden, and Organic Matter," *Environmental Science & Technology*, vol. 34, pp. 1125-1131, 2000.
- [8] M. Hauschild, "International consensus model for comparative assessment of chemiclas," ed: SETAC Europe Annual Meeting 2007, 2007, p. 14.
- [9] M. Pizzol, P. Christensen, J. Schmidt, and M. Thomsen, "Eco-toxicological impact of "metals" on the aquatic and terrestrial ecosystem: A comparison between eight different methodologies for Life Cycle Impact Assessment (LCIA)," *Journal of Cleaner Production*, vol. 19, pp. 687-698, 2011.
- [10] S. Haye, V. I. Slaveykova, and J. Payet, "Terrestrial ecotoxicity and effect factors of metals in life cycle assessment (LCA)," *Chemosphere*, pp. 1489-1496, 2007.
- [11] M. Strandesen, M. Birkved, P. E. Holm, and M. Z. Hauschild, "Fate and distribution modelling of metals in life cycle impact assessment," *Ecological Modelling*, pp. 327-338, 2007.
- [12] T. Ligthart, L. Aboussouan, D. van de meent, M. Schönnenbeck, M. Hauschild, K. Delbeke, *et al.*, "Declaration of Apeldoorn on LCIA of Non-Ferro Metals," in *Workshop organised by TNO and CML*, Apeldoorn, Netherlands, 2004, pp. 1-2.



- [13] M. L. Diamond, N. Gandhi, W. J. Adams, J. Atherton, S. P. Bhavsar, C. Bulle, *et al.*, "The clearwater consensus: the estimation of metal hazard in freshwater," *International Journal of Life Cycle Assessment*, vol. 15, pp. 143-147, 2010.
- [14] N. Gandhi, M. Diamond, D. van de meent, M. A. J. Huijbregts, W. J. G. M. Peijnenburg, and J. Guinée, "New Method for Calculating Comparative Toxicity Potential of Cationic Metals in Freshwater: Application to Copper, Nickel, and Zinc," *Environmental Science & Technology*, vol. 44, pp. 5195-5201, 2010.
- [15] N. Gandhi, M. A. J. Huijbregts, D. van de meent, W. J. G. M. Peijnenburg, J. Guinée, and M. L. Diamond, "Implications of geographic variability on Comparative Toxicity Potentials of Cu, Ni and Zn in freshwaters of Canadian ecoregions," *Chemosphere*, vol. 8, pp. 268-277, 2011.
- [16] N. Gandhi, M. L. Diamond, M. A. J. Huijbregts, J. B. Guinée, W. J. G. M. Peijnenburg, and D. van de Meent, "Implications of considering metal bioavailability in estimates of freshwater ecotoxicity: examination of two case studies," *International Journal of Life Cycle Assessment*, vol. 16, pp. 774-787, 2011.
- [17] Y. Dong, N. Gandhi, and M. Z. Hauschild, "Development of Comparative Toxicity Potentials of 14 cationic metals in freshwater," *Chemosphere*, vol. 112, pp. 26-33, 2014.
- [18] K. S. Christiansen, P. E. Holm, O. K. Borggaard, and M. Z. Hauschild, "Addressing Speciation in the Effect Factor for Characterisation of Freshwater Ecotoxicity - the case of copper," *International Journal of Life Cycle Assessment*, vol. 16, pp. 761-773, 2011.
- [19] M. Owsianiak, R. K. Rosenbaum, M. A. J. Huijbregts, and M. Z. Hauschild, "Addressing Geographic Variability in the Comparative Toxicity Potential of Copper and Nickel in Soils," *Environmental Science & Technology*, vol. 47, pp. 3241-3250, 2013.
- [20] J. E. Groenenberg, J. J. Dijkstra, L. T. C. Bonten, W. de vries, and R. N. J. Comans, "Evaluation of the performance and limitations of empirical partition-relations and process based multisurface models to predict trace element solubility in soils," *Environmental Pollution*, vol. 166, pp. 98-107, 2012.
- [21] J. E. Groenenberg, G. F. Koopmans, and R. N. J. Comans, "Uncertainty Analysis of the Nonideal Competitive Adsorption - Donnan Model: Effects of Dissolved Organic Matter Variability on Predicted Speciation in Soil Solution," *Environmental Science & Technology*, vol. 44, pp. 1340-1346, 2010.
- [22] Y. Ge, "Speciation and Complexation of Trace Metals in Eastern Canadian Soils," Doctor of Philosophy, Department of Natural Resource Sciences McGill University, Montreal, 2002.
- [23] S. Sauvé, "Speciation of Metals in Soils," in *Bioavailability of Metals in Terrestrial Ecosystems: Importance of Partitioning for Bioavailability to Invertebrates, Microbes and Plants*, H. E. Allen, Ed., ed Pensacola, USA: SETAC, 2002, pp. 7-37.
- [24] A. Ramaswami, J. B. Milford, and M. J. S. Small, *Integrated Environmental Modeling - Pollutant Transport, Fate, and Risk in the Environment*. Hoboken, NJ: John Wiley & Sons, 2005.

- [25] D. W. Pennington, M. Margni, J. Payet, and O. Jolliet, "Risk and Regulatory Hazard-Based Toxicological Effect Indicators in Life-Cycle Assessment (LCA)," *Human and Ecological Risk Assessment*, vol. 12, pp. 450-475, 2006.
- [26] O. Jolliet, M. Saadé, and P. Crettaz, *Analyse du cycle de vie - Comprendre et réaliser un écobilan*, 1 ed. vol. 23. Lausanne: Presses polytechniques et universitaires romandes, 2005.
- [27] T. E. Norgate, S. Jahanshahi, and W. J. Rankin, "Assessing the environmental impact of metal production processes," *Journal of Cleaner Production*, pp. 838-848, 2007.
- [28] J. Godin, "Évaluation environnementale de la réhabilitation d'un terrain contaminé par des résidus de l'industrie de l'aluminium de première fusion," Maîtrise ès sciences appliquées, Département de génie chimique, École Polytechnique de Montréal, Montréal, 2004.
- [29] B. G. Hermann, C. Kroeze, and W. Jawjit, "Assessing environmental performance by combining life cycle assessment, multi-criteria analysis and environmental performance indicators," *Journal of Cleaner Production*, pp. 1787-1796, 2007.
- [30] S. Durucan, A. Korre, and G. Munoz-Melendez, "Mining life cycle modelling: a cradle-to-gate approach to environmental management in the minerals industry," *Journal of Cleaner Production*, pp. 1057-1070, 2006.
- [31] J. Seppälä, S. Koskela, M. Melanen, and M. Palperi, "The Finnish metals industry and the environment," *Resources, Conservation and Recycling*, pp. 61-76, 2002.
- [32] S. Lundie, M. A. J. Huijbregts, H. V. Rowley, N. J. Mohr, and A. J. Feitz, "Australian characterisation factors and normalisation figures for human toxicity and ecotoxicity," *Journal of Cleaner Production*, pp. 819-832, 2007.
- [33] R. K. Rosenbaum, T. M. Bachman, L. Swirsky Gold, M. A. J. Huijbregts, O. Jolliet, R. Juraske, *et al.*, "USEtox-the UNEP-SETAC toxicity model: recommended characterisation factors for human toxicity and freshwater ecotoxicity in life cycle impact assessment," *International Journal of Life Cycle Assessment*, vol. 13, pp. 532-546, 2008.
- [34] H. F. Larsen and M. Hauschild, "GM-Troph A Low Data Demand Ecotoxicity Effect Indicator for Use in LCIA," *International Journal of Life Cycle Assessment*, vol. 12, pp. 79-91, 2007.
- [35] J. Payet, "Assessing Toxic Impacts on Aquatic Ecosystems in Life Cycle Assessment," Philosophiae Doctor, Science et Ingénierie de l'Environnement, École Polytechnique Fédérale de Lausanne, Lausanne, 2004.
- [36] M. Z. Hauschild, M. Huijbregts, O. Jolliet, M. Macleod, M. Margni, D. van de meent, *et al.*, "Building a Model Based on Scientific Consensus for Life Cycle Impact Assessment of Chemicals: The Search for Harmony and Parsimony," *Environmental Science & Technology*, vol. 42, pp. 7032-7037, 2008.
- [37] T. M. Bachmann, *Hazardous Substances and Human Health - Exposure, Impact and External Cost Assessment at the European Scale* vol. 8. Amsterdam, The Netherlands: Elsevier, 2006.

- [38] D. W. Pennington, M. Margni, C. Ammann, and O. Jolliet, "Multimedia Fate and Human Intake Modeling: Spatial versus Nonspatial Insights for Chemical Emissions in Western Europe," *Environmental Science & Technology*, vol. 39, pp. 1119-1128, 2005.
- [39] S. Humbert, R. Manneh, S. Shaked, C. Wannaz, A. Horvath, L. Deschênes, *et al.*, "Assessing regional intake fractions in North America," *Science of the Total Environment*, vol. 407, pp. 4812-4820, 2009.
- [40] L. Toffoletto, C. Bulle, J. Godin, C. Reid, and L. Deschênes, "LUCAS - A New LCIA Method Used for a CANadian-Specific Context," *International Journal of Life Cycle Assessment*, vol. 12, pp. 93-102, 2007.
- [41] M. Huijbregts, M. Hauschild, O. Jolliet, M. Margni, T. McKone, R. K. Rosenbaum, *et al.*, "USEtox<sup>TM</sup> User manual," USEtox<sup>TM</sup> Team February 2010 2010.
- [42] M. Z. Hauschild, T. E. McKone, D. van de meent, M. Huijbregts, M. Margni, R. K. Rosenbaum, *et al.*, "USEtox<sup>TM</sup> 1.01 - UNEP/SETAC model for the comparative assessment of chemicals released to air, water and soil and their toxic effects on the human population and ecosystems," ed: UNEP/SETAC, 2010.
- [43] O. Jolliet, M. Margni, R. Charles, S. Humbert, J. Payet, G. Rebitzer, *et al.*, "IMPACT 2002+: A New Life Cycle Impact Assessment Methodology," *International Journal of LCA*, vol. 8, pp. 324-330, 2003.
- [44] S. Humbert, M. Margni, and O. Jolliet, "IMPACT 2002+: User Guide - Draft for version 2.1," École Polytechnique Fédérale de Lausanne 2005.
- [45] M. Goedkoop, R. Heijungs, M. Huijbregts, A. De Schryver, J. Struijs, and R. van Zelm, "ReCiPe 2008 - A life cycle impact assessment method which comprises harmonised category indicators at the midpoint and the endpoint level - First edition - Report I: Characterisation," Ruimte en Milieu - Ministerie van Volkshuisvesting, Ruimtelijke Ordening en Milieubeheer 2009.
- [46] M. A. J. Huijbregts, U. Thissen, J. B. Guinée, T. Jager, D. Kalf, D. van de Meent, *et al.*, "Priority assessment of toxic substances in life cycle assessment. Part I: Calculation of toxicity potentials for 181 substances with the nested multi-media fate, exposure and effects model USES-LCA," *Chemosphere*, vol. 41, pp. 541-573, 2000.
- [47] M. Z. Hauschild, "Assessing Environmental Impacts in a Life-Cycle Perspective," *Environmental Science & Technology*, vol. 39, pp. 81A-88A, 2005.
- [48] A. S. Hursthouse, "The relevance of speciation in the remediation of soils and sediments contaminated by metallic elements - an overview and examples from Central Scotland UK," *Journal of Environmental Monitoring*, pp. 49-60, 2001.
- [49] B. Cancès, M. Ponthieu, M. Castrec-Rouelle, E. Aubry, and M. F. Benedetti, "Metal ions speciation in a soil and its solution: experimental data and model results," *Geoderma*, pp. 341-355, 2003.
- [50] G. M. Hettiarachchi, "Bioavailability, Toxicity, and Risk Relationship in Ecosystems," *Journal of Environmental Quality*, vol. 35, pp. 951-952, May-June 2006.

- [51] A. Barona, F. Romero, and C. Elejade, "Soil-metal interactions: Associations of macroconstituent fractions in selected soils," *Journal of Hazardous Materials*, pp. 289-301, 1995.
- [52] L. Landner and R. Reuther, *Metals in Society and in the Environment - 19073*: Springer, 2005.
- [53] N. M. Hassan, "Metal speciation dynamics in freshwaters: a kinetic exploration," Doctor of Philosophy, Department of Chemistry, Carleton University, Ottawa, 2003.
- [54] P. L. Williams, R. C. James, and S. M. Roberts, *Principles of toxicology: environmental and industrial applications*, 2 ed. New York: John Wiley and Sons, 2000.
- [55] T. L. Daulton, B. J. Little, and K. Lowe, "Determination of Chromium Oxidation State in Cultures of Dissimilatory Metal Reducing Bacteria by Electron Energy Loss Spectroscopy," in *Microscopy and Microanalysis - August 3-7 2003*, San Antonio, Texas, 2003, p. 2.
- [56] L. A. Oste, E. J. M. Temminghoff, T. M. Lexmond, and W. H. van Riemsdijk, "Measuring and Modeling Zinc and Cadmium Binding by Humic Acid," *Analytical Chemistry*, vol. 74, pp. 856-862, 2002.
- [57] I. Al-Fasfous, "Metal speciation in natural water: evaluating kinetics versus equilibrium," Doctor of Philosophy, Department of Chemistry, Carleton University, Ottawa, 2005.
- [58] R. F. Brennan, "Zinc Application and Its Availability to Plants," Doctor of Philosophy, School of Environmental Science, Division of Science and Engineering, Murdoch University, 2005.
- [59] J. P. M. Vink, "The origin of speciation: Trace metal kinetics over natural water/sediment interfaces and the consequences for bioaccumulation," *Environmental Pollution*, vol. 157, pp. 519-527, 2009.
- [60] " ".
- [61] S. P. Bhavsar, N. Gandhi, and M. L. Diamond, "Extension of coupled multispecies metal transport and speciation (TRANSPEC) model to soil," *Chemosphere*, vol. 70, pp. 914-924, 2008.
- [62] H. E. Allen, Ed., *Bioavailability of Metals in Terrestrial Ecosystems: Importance of Partitioning for Bioavailability to Invertebrates, Microbes, and Plants* (Metals and the Environment Series. Pensacola, Florida, USA: SETAC Press, 2002, p.^pp. Pages.
- [63] Y. Ge, "Trace Metal Speciation and Bioavailability in Urban Contaminated Soils," Master of Science, Department of Natural Resource Sciences, McGill University, Montréal, 1999.
- [64] J. P. Gustafsson, P. Pechova, and D. Berggren, "Modeling Metal Binding to Soils: The Role of Natural Organic Matter," *Environmental Science & Technology*, vol. 37, pp. 2767-2774, 2003.
- [65] S. Hellweg, U. Fischer, T. B. Hofstetter, and K. Hungerbühler, "Site-dependent fate assessment in LCA: transport of heavy metals in soil," *Journal of Cleaner Production*, pp. 341-361, 2005.

- [66] L. K. Koopal, T. Saito, J. P. Pinheiro, and W. H. van Riemsdijk, "Ion binding to natural organic matter: General considerations and the NICA–Donnan model," *Colloids and Surfaces A: Physicochemical Engineering Aspects*, pp. 40-54, 2005.
- [67] C. Kantar, "Heterogeneous processes affecting metal ion transport in the presence of organic ligands: Reactive transport modeling," *Earth-Science Reviews*, pp. 175-198, 2007.
- [68] M. McBride, S. Sauvé, and W. Hendershot, "Solubility control of Cu, Zn, Cd and Pb in contaminated soils," *European Journal of Soil Science*, vol. 48, pp. 337-346, 1997.
- [69] C. Carlon, M. Dalla Valle, and A. Marcomini, "Regression models to predict water–soil heavy metals partition coefficients in risk assessment studies," *Environmental Pollution*, pp. 109-115, 2004.
- [70] A. Kabata-Pendias and A. B. Mukherjee. (2007). *Trace Elements from Soil to Human* Available: <http://www.myilibrary.com?id=93570>  
<http://www.springerlink.com/openurl.asp?genre=book&isbn=978-3-540-32713-4>
- [71] S. H. Chadi, F. Courchesne, W. H. Hendershot, S. P. McGrath, A. M. Chaudri, V. Sappin-Didier, *et al.*, "Speciation of zinc in contaminated soils," *Environmental Pollution*, vol. 155, pp. 208-216, 2008.
- [72] A. L. Nolan, M. J. McLaughlin, and S. D. Mason, "Chemical Speciation of Zn, Cd, Cu, and Pb in Pore Waters of Agricultural and Contaminated Soils Using Donnan Dialysis," *Environmental Science & Technology*, vol. 37, pp. 90-98, 2003.
- [73] B. P. Knight, A. M. Chaudri, S. P. McGrath, and K. E. Giller, "Determination of chemical availability of cadmium and zinc in soils using inert soil moisture samplers," *Environmental Pollution*, vol. 99, pp. 293-298, 1998.
- [74] Q. Wu, W. H. Hendershot, W. D. Marshall, and Y. Ge, "Speciation of Cadmium, Copper, Lead, and Zinc in Contaminated Soils," *Communications in Soil Science and Plant Analysis*, vol. 31, pp. 1129-1144, 2000.
- [75] K. Catlett, D. M. Heil, W. L. Lindsay, and M. H. Ebinger, "Soil Chemical Properties Controlling Zinc<sup>2+</sup> Activity in 18 Colorado Soils," *Soil Science Society of America Journal*, vol. 66, pp. 1182-1189, 2002.
- [76] A. P. Aldrich, D. Kistler, and L. Sigg, "Speciation of Cu and Zn in Drainage Water from Agricultural Soils," *Environmental Science & Technology*, vol. 36, pp. 4824-4830, 2002.
- [77] B. C. Bostick, C. M. Hansel, M. J. La Force, and S. Fendorf, "Seasonal Fluctuations in Zinc Speciation within a Contaminated Wetland," *Environmental Science & Technology*, vol. 35, pp. 3823-3829, 2001.
- [78] S. Bertling, I. O. Wallinder, C. Leygraf, and D. B. Kleja, "Occurrence and fate of corrosion-induced zinc in runoff water from external structures," *Science of the Total Environment*, vol. 367, pp. 908-923, 2006.
- [79] N. J. Barrow, "Testing a mechanistic model. II. The effects of time and temperature on the reaction of zinc with a soil," *Journal of Soil Science*, vol. 37, pp. 277-286, 1986.
- [80] R. L. Chaney, "Zinc Phytotoxicity," in *Zinc in Soils and Plants*, A. D. Robson, Ed., ed. Netherlands: Kluwer Academic Publishers, 1993, pp. 135-144.

- [81] C. E. Martinez and H. L. Motto, "Solubility of lead, zinc and copper added to mineral soils," *Environmental Pollution*, vol. 107, pp. 153-158, 2000.
- [82] S. Niyogi and C. M. Wood, "Biotic Ligand Model, a Flexible Tool for Developing Site-Specific Water Quality Guidelines for Metals," *Environmental Science & Technology*, vol. 38, pp. 6177-6192, 2004.
- [83] S. Lofts, D. J. Spurgeon, C. Svendsen, and E. Tipping, "Deriving Soil Critical Limits for Cu, Zn, Cd, and Pb: A Method Based on Free Ion Concentrations," *Environmental Science & Technology*, vol. 38, pp. 3623-3631, 2004.
- [84] R. L. Hough, A. M. Tye, N. M. J. Crout, S. P. McGrath, H. Zhang, and S. D. Young, "Evaluating a 'Free Ion Activity Model' applied to metal uptake by *Lolium perenne* L. grown in contaminated soils.," *Plant and Soil*, pp. 1-12, 2005.
- [85] P. M. C. Antunes, E. J. Berkelaar, D. Boyle, B. A. Hale, W. Hendershot, and A. Voigt, "THE BIOTIC LIGAND MODEL FOR PLANTS AND METALS: TECHNICAL CHALLENGES FOR FIELD APPLICATION," *Environmental Toxicology and Chemistry*, vol. 25, pp. 875-882, Mars 2006 2006.
- [86] I. Gaabass, "Chemical Speciation of Zn(II), Cd(II), Pb(II) and Cu(II) in Solutions of Humic Acid: A Multi-Method Approach," Master of Science (Chemistry), Acadia University, 2006.
- [87] H. E. Allen, "Terrestrial Ecosystems: An Overview," in *Bioavailability of Metals in Terrestrial Ecosystems: Importance of Partitioning for Bioavailability to Invertebrates, Microbes, and Plants*, H. E. Allen, Ed., ed Pensacola, USA: Society of Environmental Toxicology and Chemistry (SETAC), 2002, pp. 1-5.
- [88] N. M. J. Crout, A. M. Tye, H. Zhang, S. P. McGrath, and S. D. Young, "Kinetics of metal fixation in soils: measurement and modeling by isotopic dilution," *Environmental Toxicology and Chemistry*, vol. 25, pp. 659-663, 2006.
- [89] T. Leveque, Y. Capowiez, E. Schreck, C. Mazzia, M. Auffan, Y. Foucault, *et al.*, "Assessing ecotoxicity and uptake of metals and metalloids in relation to two different earthworm species (*Eisenia hortensis* and *Lumbricus terrestris*)," *Environmental Pollution*, vol. 179, pp. 232-241, 2013.
- [90] JRC-IHCP, "European Union Risk Assessment Report - Zinc Metal," European Commission Joint Research Centre Institute for Health and Consumer Protection 2008.
- [91] J. D. Allison and T. L. Allison, "Partition Coefficients for Metals in Surface Water, Soil, and Waste," U. S. Environmental Protection Agency - Office of Research and Development, Washington, DC July 2005 2005.
- [92] J. M. Ferguson, "Computer Based Modeling of Environmental Contaminants," Master of Science, Graduate School of Natural and Environmental Sciences - Department of Environmental Science and Management, Duquesne University, 1995.
- [93] R. Heijungs, "Dynabox: A dynamic multi-media fate model with applications to heavy metals," Centre of Environmental Science, Leiden University, Leiden, The Netherlands 1999.

- [94] B. S. Caruso, "Modeling Metals Transport and Sediment/Water Interactions in a Mining Impacted Mountain Stream," *Journal of the American Water Resources Association*, vol. 40, pp. 1603-1615, 2004.
- [95] J. J. Dijkstra, J. C. L. Meeussen, and R. N. J. Comans, "Leaching of Heavy Metals from Contaminated Soils: An Experimental and Modeling Study," *Environmental Science & Technology*, vol. 38, pp. 4390-4395, 2004.
- [96] M. Fan, "Modeling Contaminant Transport and Fate and Subsequent Impacts on Ecosystems," Doctor of Philosophy in Environmental Engineering, Department of Civil and Environmental Engineering, New Jersey Institute of Technology, 2004.
- [97] W. H. Van Riemsdijk, L. Weng, and T. Hiemstra, "8. Ion - Colloid - Colloid Interactions," in *Colloidal Transport in Porous Media*, F. H. Frimmel, F. von der Kammer, and H.-C. Flemming, Eds., ed: Springer, 2007, pp. 205-250.
- [98] B. S. Caruso, "Simulation of Metals Total Maximum Daily Loads and Remediation in a Mining-Impacted Stream," *Journal of Environmental Engineering*, vol. 131, pp. 777-789, May 2005 2005.
- [99] M. Šejna, J. Šimůnek, and M. T. van Genuchten, "The HYDRUS Software Package for Simulating the Two- and Three-Dimensional Movement of Water, Heat, and Multiple Solutes in Variably-Saturated Porous Media - User Manual - Version 2.04," PC-Progress, Ed., ed: PC-Progress, 2014, p. 305.
- [100] C. Akselsson, H. U. Sverdrap, and J. Holmqvist, "Estimating Weathering Rates of Swedish Forest Soils in Different Scales, Using the PROFILE Model and Affiliated Database," *Journal of Sustainable Forestry*, vol. 21, pp. 119-131, 2008.
- [101] N. Gandhi, "Development of Coupled Mercury Fate - TRANsport, SPECiation and BIOaccumulation (BIOTRANSPEC) Model: Application to Lahontan Reservoir, Nevada," Master of Applied Science, Graduate Department of Chemical Engineering and Applied Chemistry, University of Toronto, Toronto, 2003.
- [102] Y. Ge, D. MacDonald, S. Sauvé, and W. Hendershot, "Modeling of Cd and Pb speciation in soil solutions by WinHumicV and NICA-Donnan model," *Environmental Modelling & Software*, pp. 353-359, 2005.
- [103] E. Tipping, "Modelling Al competition for heavy metal binding by dissolved organic matter in soil and surface waters of acid and neutral pH," *Geoderma*, pp. 293-304, 2005.
- [104] A. R. Almas, P. Lombnaes, T. A. Sogn, and J. Mulder, "Speciation of Cd and Zn in contaminated soils assessed by DGT-DIFS, and WHAM/Model VI in relation to uptake by spinach and ryegrass," *Chemosphere*, pp. 1647-1655, 2006.
- [105] M. Simonsson, "Interactions of aluminium and fulvic acid in moderately acid solutions: stoichiometry of the  $H^+/Al^{3+}$  exchange," *European Journal of Soil Science*, vol. 51, pp. 655-666, 2000.
- [106] S. Lofts, "User's Guide to WHAM7," Center for Ecology & Hydrology, Natural Environment Research Council 2012.

- [107] B. Cloutier-Hurteau, S. Sauvé, and F. Courchesne, "Comparing WHAM 6 and MINEQL+ 4.5 for the Chemical Speciation of  $\text{Cu}^{2+}$  in the Rhizosphere of Forest Soils," *Environmental Science & Technology*, vol. 41, pp. 8104-8110, 2007.
- [108] Z. Shi, H. E. Allen, D. M. Di toro, S.-Z. Lee, D. M. Flores Meza, and S. Lofts, "Predicting cadmium adsorption on soils using WHAM VI," *Chemosphere*, vol. 69, pp. 605-612, 2007.
- [109] Z. Shi, D. M. Di toro, H. E. Allen, and D. L. Sparks, "A WHAM-based Kinetics Model for Zn Adsorption and Desorption to Soils," *Environmental Science & Technology*, vol. 42, pp. 5630-5636, 2008.
- [110] L. Weng, E. J. M. Temminghoff, S. Lofts, E. Tipping, and W. H. van Riemsdijk, "Complexation with Dissolved Organic Matter and Solubility Control of Heavy Metals in a Sandy Soil," *Environmental Science & Technology*, vol. 36, pp. 4804-4810, 2002.
- [111] E. Meers, V. R. Unamuno, G. Du Laing, J. Vangronsveld, K. Vanbroekhoven, R. Samson, *et al.*, "Zn in the soil solution of unpolluted and polluted soils as affected by soil characteristics," *Geoderma*, vol. 136, pp. 107-119, 2006.
- [112] S. Thakali, "Terrestrial biotic ligand model (TBLM) for copper, and nickel toxicities to plants, invertebrates, and microbes in soils," Doctor of Philosophy in Civil Engineering, University of Delaware, 2006.
- [113] S. Thakali, H. E. Allen, D. M. Di toro, A. A. Ponizovsky, C. P. Rooney, F.-J. Zhao, *et al.*, "A Terrestrial Biotic Ligand Model. 1. Development and Application to Cu and Ni Toxicities to Barley Root Elongation in Soils," *Environmental Science & Technology*, vol. 40, pp. 7085-7093, 2006.
- [114] A. A. Ponizovsky, S. Thakali, D. M. Di Toro, A. J. Ackerman, and D. M. Metzler, "Nickel partitioning in acid soils at low moisture content," *Geoderma*, vol. 145, pp. 69-76, 2008.
- [115] L. T. C. Bonten, J. E. Groenenberg, L. Weng, and W. H. van Riemsdijk, "Use of speciation and complexation models to estimate heavy metal sorption in soils," *Geoderma*, vol. 146, pp. 303-310, 2008.
- [116] F. Wu, Y. Mu, H. Chang, X. Zhao, J. Giesy, and K. B. Wu, "Predicting Water Quality Criteria for Protecting Aquatic Life from Physicochemical Properties of Metals or Metalloids," *Environmental Science & Technology*, vol. 47, pp. 446-453, 2013.
- [117] K. Lock, K. A. C. de Schamphelaere, S. Becaus, P. Criel, H. van Eeckhout, and C. R. Janssen, "Development and validation of a terrestrial biotic ligand model predicting the effect of cobalt on root growth of barley (*Hordeum vulgare*)," *Environmental Pollution*, vol. 147, pp. 626-633, 2007.
- [118] K. A. C. de Schamphelaere and C. R. Janssen, "**A Biotic Ligand Model Predicting Acute Copper Toxicity for *Daphnia magna*: The Effects of Calcium, Magnesium, Sodium, Potassium, and pH**," *Environmental Science & Technology*, vol. 36, pp. 48-54, 2002.
- [119] S. Thakali, H. E. Allen, D. M. di Toro, A. A. Ponizovsky, C. P. Rooney, F.-J. Zhao, *et al.*, "Terrestrial Biotic Ligand Model. 2. Application to Ni and Cu Toxicities to Plants,



- Invertebrates, and Microbes in Soil," *Environmental Science & Technology*, vol. 40, pp. 7094-7100, 2006.
- [120] M. Koster, A. de Groot, M. Vijver, and W. Peijnenburg, "Copper in the terrestrial environment: Verification of a laboratory-derived terrestrial biotic ligand model to predict earthworm mortality with toxicity observed in field soils," *Soil Biology & Biochemistry*, vol. 38, pp. 1788-1796, 2006.
- [121] S. Lofts, P. Criel, C. R. Janssen, K. Lock, S. P. McGrath, K. Oorts, *et al.*, "Modelling the effects of copper on soil organisms and processes using the free ion approach: Towards a multi-species toxicity model," *Environmental Pollution*, vol. 178, pp. 244-253, 2013.
- [122] X. Wang, B. Li, Y. Ma, and L. Hua, "Development of a biotic ligand model for acute zinc toxicity to barley root elongation," *Ecotoxicology and Environmental Safety*, vol. 73, pp. 1272-1278, 2010.
- [123] J. An, S. Jeong, H. S. Moon, E. H. Jho, and K. Nam, "Prediction of Cd and Pb toxicity to *Vibrio fischeri* using biotic ligand-based models in soil," *Journal of Hazardous Materials*, vol. 203-204, pp. 69-76, 2012.
- [124] T. N. Ligthart, R. H. Jongbloed, and J. E. Tamis, "A method for improving Centre for Environmental Studies (CML) characterisation factors for metal (eco)toxicity — the case of zinc gutters and downpipes," *International Journal of Life Cycle Assessment*, vol. 15, pp. 745-756, 2010.
- [125] S. M. Rodrigues, B. Henriques, E. Ferreira da Silva, M. E. Pereira, A. C. Duarte, J. E. Groenenberg, *et al.*, "Evaluation of an approach for the characterization of reactive and available pools of 20 potentially toxic elements in soils: Part II - Solid-solubion partition relationships and ion activity in soil solutions," *Chemosphere*, vol. 81, pp. 1560-1570, 2010.
- [126] S. M. Rodrigues, B. Henriques, E. Ferreira da Silva, M. E. Pereira, and P. F. A. M. Römkens, "Evaluation of an approach for the characterization of reactive and available pools of twenty potentially toxic elements in soils: Part 1 - The role of key soil properties in the variation of contaminants' reactivity," *Chemosphere*, vol. 81, pp. 1549-1559, 2010.
- [127] P. F. A. M. Römkens, J. E. Groenenberg, L. T. C. Bonten, W. de Vries, and J. Bril, "Derivation of partition relationships to calculate Cd, Cu, Ni, Pb and Zn solubility and activity in soil solutions," Alterra, Wageningen 2004.
- [128] W. de Vries and J. E. Groenenberg, "Evaluation of approaches to calculate critical metal loads for forest ecosystems," *Environmental Pollution*, vol. 157, pp. 3422-3432, 2009.
- [129] S. Oscarson, "Communiqué - Création d'une Chaire industrielle internationale de 4,5 M\$ en analyse du cycle de vie à l'École Polytechnique de Montréal," CIRAIG, Ed., ed. Montréal, Canada: CIRAIG, 2007.
- [130] H. S. Matthews, "Meeting the EuP Directive: Life Cycle Assessment Information Sharing as Opportunity for Global Compliance," in *Electronics & the Environment, Proceedings of the 2007 IEEE International Symposium on*, 2007, pp. 155-158.

- [131] MDDEP, "Politique québécoise de gestion des matières résiduelles - Plan d'action 2011-2015 - Allier économie et environnement," E. e. P. Q. Développement durable, Ed., ed. Québec: Gouvernement du Québec, 2011, p. 34.
- [132] S. Lofts and E. Tipping, "WINDERMERE HUMIC AQUEOUS MODEL, v6.0," Natural Environmental Research Council 2001.
- [133] A. Lautier, R. K. Rosenbaum, M. Margni, J. Bare, P.-O. Roy, and L. Deschênes, "Development of normalization factors for Canada and the United States and comparison with European factors," *Science of the Total Environment*, 2010.
- [134] D. C. Gooddy, P. Shand, D. G. Kinniburgh, and W. H. van Riemsdijk, "Field-based partition coefficients for trace elements in soil solutions," *European Journal of Soil Science*, vol. 46, pp. 265-285, 1995.
- [135] S. E. Lorenz, R. E. Hamon, P. E. Holm, H. C. Domingues, E. M. Sequeira, T. H. Christensen, *et al.*, "Cadmium and zinc in plants and soil solutions from contaminated soils," *Plant and Soil*, vol. 189, pp. 21-31, 1997.
- [136] A. C. de Groot, W. J. G. M. Peijnenburg, M. A. G. T. van den Hoop, R. Ritsema, and R. P. M. van Veen, "Heavy metals in Dutch field soils: an experimental and theoretical study on equilibrium partitioning," Laboratory for Ecotoxicity, National Institute of Public Health and the Environment, Bilthoven, The Netherlands 1998.
- [137] P. E. Holm, T. H. Christensen, S. E. Lorenz, R. E. Hamon, H. C. Domingues, E. M. Sequeira, *et al.*, "Measured soil water concentrations of cadmium and zinc in plant pots and estimated leaching outflows from contaminated soils," *Water Air and Soil Pollution*, vol. 102, pp. 105-115, 1998.
- [138] J. J. C. Dawson, C. D. Campbell, W. Towers, C. M. Cameron, and G. I. Paton, "Linking biosensor responses to Cd, Cu and Zn partitioning in soils," *Environmental Pollution*, vol. 142, pp. 493-500, 2006.
- [139] F. Degryse and E. Smolders, "Mobility of Cd and Zn in polluted and unpolluted Spodosols," *European Journal of Soil Science*, vol. 57, pp. 122-133, 2006.
- [140] C. A. M. van Gestel, "Physico-chemical and biological parameters determine metal bioavailability in soils," *Science of the Total Environment*, vol. 406, pp. 385-395, 2008.
- [141] K.-R. Kim and G. Owens, "Chemodynamics of heavy metals in long-term contaminated soils: Metal speciation in soil solution," *Journal of Environmental Sciences*, vol. 21, pp. 1532-1540, 2009.
- [142] K.-R. Kim, G. Owens, R. Naidu, and S.-I. Kwon, "Influence of plant roots on rhizosphere soil solution composition of long-term contaminated soils," *Geoderma*, vol. 155, pp. 86-92, 2010.
- [143] D. Rheinheimer dos Santos, P. Cambier, F. J. K. Mallmann, J. Labanowski, I. Lamy, D. Tessier, *et al.*, "Prospective modeling with Hydrus-2D of 50 years Zn and Pb movements in low and moderately metal-contaminated agricultural soils," *Journal of Contaminant Hydrology*, vol. 145, pp. 54-66, 2013.

- [144] F. J. K. Mallmann, D. Rheinheimer dos Santos, C. A. Ceretta, C. Cella, J. Simunek, and F. van Oort, "Modeling field-scale vertical movement of zinc and copper in a pig slurry-amended soil in Brazil," *Journal of Hazardous Materials*, vol. 243, pp. 223-231, 2012.
- [145] I. Muhammad, M. Puschenreiter, and W. W. Wenzel, "Cadmium and Zn availability as affected by pH manipulation and its assessment by soil extraction, DGT and indicator plants," *Science of the Total Environment*, vol. 416, pp. 490-500, 2012.
- [146] O. Jolliet, A. Dubreuil, T. Gloria, and M. Hauschild, "Progresses in Life Cycle Impact Assessment within the UNEP/SETAC Life Cycle Initiative," *International Journal of Life Cycle Assessment*, vol. 10, pp. 447-448, 2005.
- [147] S. P. Bhavsar, N. Gandhi, M. L. Diamond, A. S. Lock, G. Spiers, and M. C. Alfaro de la Torre, "Effects of estimates from different geochemical models on metal fate predicted by couple speciation-fate models," *Environmental Toxicology and Chemistry*, vol. 27, pp. 1020-1030, 2008.
- [148] J. C. Shi, H. Z. Wang, J. M. Xu, J. J. Wu, X. M. Liu, H. P. Zhu, *et al.*, "Spatial distribution of heavy metals in soils: a case study of Changxing, China," *Environmental Geology*, vol. 52, pp. 1-10, Mar 2007.
- [149] J. E. Groenenberg, P. F. A. M. Römken, R. N. J. Comans, J. Luster, T. Pampura, L. Shotbolt, *et al.*, "Transfer functions for solid-solution partitioning of cadmium, copper, nickel, lead and zinc in soils: derivation of relationships for free metal ion activities and validation with independent data," *European Journal of Soil Science*, vol. 61, pp. 58-73, 2010.
- [150] A. L. Nolan, H. Zhang, and M. J. McLaughlin, "Prediction of Zinc, Cadmium, Lead, and Copper Availability to Wheat in Contaminated Soils Using Chemical Speciation, Diffusive Gradients in Thin Films, Extraction, and Isotopic Dilution Techniques," *Journal of Environmental Quality*, vol. 34, pp. 496-507, 2005.
- [151] I. Lessard, "Détermination de la toxicité à long-terme du zinc sur la diversité fonctionnelle enzymatique de sols contaminés collectés sur le terrain," Philosophiae Doctor, Département de Génie Chimique - École Polytechnique de Montréal, Université de Montréal, Montréal, 2013.
- [152] C. H. Stephan, F. Courchesne, W. H. Hendershot, S. P. McGrath, A. M. Chaudri, V. Sappin-Didier, *et al.*, "Speciation of zinc in contaminated soils," *Environmental Pollution*, vol. 155, pp. 208-216, 2008.
- [153] E. Tipping, "Humic Ion-Binding Model VI : An Improved Description of the Interactions of Protons and Metal Ions with Humic Substances," *Aquatic Geochemistry*, vol. 4, pp. 3-48, 1998.
- [154] S. Lofts and E. Tipping, "An assemblage model for cation binding by natural particulate matter," *Geochimica et Cosmochimica Acta*, vol. 62, pp. 2609-2625, 1998.
- [155] K. Fenner, M. Scheringer, M. MacLeod, M. Matthies, T. McKone, M. Stroebe, *et al.*, "Comparing Estimates of Persistence and Long-Range Transport Potential among Multimedia Models," *Environmental Science & Technology*, vol. 39, pp. 1932-1942, 2005.

- [156] T. D. Gauthier, "Detecting Trends Using Spearman's Rank Correlation Coefficient," *Environmental Forensics*, vol. 2, pp. 359-362, 2001.
- [157] P. Duchaufour, *Introduction à la science du sol - Sol, végétation, environnement*, 6e édition ed. Paris: Dunod, 2001.
- [158] Addinsoft, "XLSTAT," Addinsoft, Ed., 2013.3.05 ed: Addinsoft, 2013.
- [159] FAO/IIASA/ISRIC/ISS-CAS/JRC, "Harmonized World Soil Database (version 1.1)," FAO, Rome, Italy and IIASA, Laxenburg, Austria 2009.
- [160] M. Z. Hauschild, M. Goedkoop, J. Guinée, R. Heijungs, M. Huijbregts, O. Joliet, *et al.*, "Identifying best existing practice for characterization modeling in life cycle impact assessment," *International Journal of Life Cycle Assessment*, vol. 18, pp. 683-697, 2013.
- [161] H. F. Larsen and M. Hauschild, "Evaluation of Ecotoxicity Effect Indicators for Use in LCIA," *International Journal of LCA*, vol. 12, pp. 24-33.4, 2007.
- [162] USEtoxTEAM. (2004, 2014-09-19). *Extrapolated EC50 data and QSARs in calculation of new CFs and interpretation of trophic levels*. Available: <http://www.usetox.org/forums/other-questions/extrapolated-ec50-data-and-qsars-calculation-new-cfs-and-interpretation>
- [163] J. L. Gerberding, "Toxicological Profile for Zinc," U.S. Department of Health and Human Services, Public Health Service, Agency for Toxic Substances and Disease Registry 2005.
- [164] CITEPA. (2014, 2014-09-19). *Zinc-Zn*. Available: <http://www.citepa.org/fr/pollution-et-climat/polluants/metaux-lourds/zinc>
- [165] EPA. (2011, 2014-09-19). *Common Contaminants - Fact Flash - Zinc*. Available: [http://www.epa.gov/superfund/students/clas\\_act/haz-ed/ff\\_09.htm](http://www.epa.gov/superfund/students/clas_act/haz-ed/ff_09.htm)
- [166] IREP. *Exploitation des résultats réalisés à partir des déclarations 2012 des émissions industrielles - Zinc et ses composés (Zn)* [Online]. Available: <http://www.irep.ecologie.gouv.fr/IREP/index.php>
- [167] CIESIN-Columbia-University-FAO-CIAT, "Gridded Population of the World: Future Estimates (GPWFE)," ed. Palisades, NY: Socioeconomic Data and Applications Center (SEDAC), Columbia University., 2005.
- [168] G. Plouffe, C. Bulle, and L. Deschênes, "Characterization Factors for Zinc Terrestrial Ecotoxicity Including Speciation," *International Journal of Life Cycle Assessment*, vol. Submitted November 16th, 2014, 2014.
- [169] K. Treyer and C. Bauer, "Life cycle inventories of electricity generation and power supply in version 3 of the ecoinvent database—part II: electricity markets," *The International Journal of Life Cycle Assessment*, pp. 1-14, 2014/01/28 2014.
- [170] B. P. Weidema, C. Bauer, R. Hischer, C. Mutel, T. Nemecek, J. Reinhard, *et al.*, "Overview and methodology - Data quality guideline for the ecoinvent database version 3, ecoinvent report No. 1 (v3)," St. Gallen: The ecoinvent Center 2013.
- [171] P. Lesage and R. Samson, "The Quebec Life Cycle Inventory Database Project," *The International Journal of Life Cycle Assessment*, pp. 1-8, 2013/05/30 2013.

- [172] S. Humbert, A. de Schryver, X. Bengoa, M. Margni, and O. Jolliet, "User Guide Draft for version Q2.21. .," Quantis2012.
- [173] J. J. Dijkstra, J. C. L. Meeussen, and R. N. J. Comans, "Evaluation of a Generic Multisurface Sorption Model for Inorganic Soil Contaminants," *Environmental Science & Technology*, vol. 43, pp. 6196-6201, 2009.
- [174] C. Fernandez, J. Labanowski, P. Cambier, A. G. Jongmans, and F. van Oort, "Fate of airborne metal pollution in soils as related to agricultural management. 1. Zn and Pb distributions in soil profiles," *European Journal of Soil Science*, vol. 58, pp. 547-559, 2007.
- [175] C. Fernandez, J. Labanowski, T. Jongmans, A. Bermond, P. Cambier, I. Lamy, *et al.*, "Fate of airborne metal pollution in soils as related to agricultural management: 2. Assessing the role of biological activity in micro-scale Zn and Pb distributions in A, B and C horizons," *European Journal of Soil Science*, vol. 61, pp. 514-524, 2010.
- [176] F. J. K. Mallmann, D. Rheinheimer dos Santos, P. Cambier, J. Labanowski, I. Lamy, M. A. Santanna, *et al.*, "Using a two site-reactive model for simulating one century changes of Zn and Pb concentration profiles in soils affected by metallurgical fallout," *Environmental Pollution*, vol. 162, pp. 294-302, 2012.
- [177] T. Keller and I. Håkansson, "Estimation of reference bulk density from soil particle size distribution and soil organic matter content," *Geoderma*, vol. 154, pp. 398-406, 2010.
- [178] Pedosphere, "Bulk Density Calculator Work Table (U.S.)," Pedosphere.ca, Ed., ed, 2011.
- [179] R. Calvet, *Le sol - Propriétés et fonctions - Tome 1 - Constitution et structure, phénomènes aux interfaces*. Paris: Éditions France Agricole, 2003.
- [180] D. Gondar, R. Lopez, S. Fiol, J. M. Antelo, and F. Arce, "Characterization and acid-base properties of fulvic and humic acids isolated from two horizons of an ombrotrophic peat bog," *Geoderma*, vol. 126, pp. 367-374, 2005.
- [181] L. Weng, E. J. M. Temminghoff, and W. H. Van Riemsdijk, "Contribution of Individual Sorbents to the Control of Heavy Metal Activity in Sandy Soil," *Environmental Science & Technology*, vol. 35, pp. 4436-4443, 2001.
- [182] A. A. Ponizovsky, S. Thakali, H. E. Allen, D. M. Di toro, and A. J. Ackerman, "Effect of Soil Properties on Copper Release in Soil Solutions at Low Moisture Content," *Environmental Toxicology and Chemistry*, vol. 25, pp. 671-682, 2006.
- [183] Cornell\_University. (2010). *Competency Area 2: Soil hydrology AEM*. Available: <http://nrcca.cals.cornell.edu/soil/CA2/CA0212.1-3.php>
- [184] Agriculture\_et\_Agroalimentaire\_Canada. *Teneur en matière organique de la couche de surface (0-25 cm)*. Available: [http://nlwis-snitel.agr.gc.ca/apaq-aapq/doc/T04MO\\_f.pdf](http://nlwis-snitel.agr.gc.ca/apaq-aapq/doc/T04MO_f.pdf)
- [185] LANO. (2011). *Calcaire total et calcaire actif / CaCO<sub>3</sub>T et CaCO<sub>3</sub> actif*.
- [186] LANO. (2011). *Capacité d'échange Cationique / C.E.C.*
- [187] R. Jahn, H.-P. Blume, V. B. Asio, O. Spaargaren, P. Schad, R. Langohr, *et al.*, "Guidelines for soil description, Fourth edition," Food and Agriculture Organization of the United Nations, Rome2006.

- [188] P. Holmgren and M. L. Wilkie, "Mise à jour de l'évaluation des ressources forestières mondiales à 2005 - Termes et Définitions (version définitive)," Département des forêts - Organisation des Nations Unies pour l'alimentation et l'agriculture (FAO), Rome 2004.

## **ANNEXE A – SUPPORTING INFORMATION POUR LE PREMIER MANUSCRIT**

### **A.1. Description of experimental soil data**

The field data used for WHAM parameterization were taken from two sources: 40 field measurements previously sampled around galvanized structures [151] and 357 additional field samples from 19 published literature studies [63, 72, 74-76, 111, 134-145]. A description of these samples and the WHAM 6.0 modeling assumptions are included in the following sections.

#### **A.1.1. Description of field data**

Field data [151] were collected according to the experimental protocol established by Sauvé et al. (2002). These samples were analyzed for total Zn, soluble Zn and labile Zn and for the main soil properties: % sand, % silt, % clay, soil pH, total carbon, total organic carbon and CEC.

#### **A.1.2. Description of literature field data**

The objective of this step was to find as many studies as possible in order to cover as many different soils around the world as possible or at least the most frequent soil types and those most sensitive to an ecotoxicological risk (those that combine enhanced bioavailability and significant contamination risk).

To select studies from literature, we looked at the selection process by Sauvé et al. (2000). The data compiled came from studies that measured:

- Total Zn content in soils using an acid digestion method
- Labile, total dissolved or free ion Zn in the corresponding soil solution

We are aware that the methods used to obtain dissolved, labile or free Zn can influence data [7].

Like in Sauvé et al. [7], many acid digestion methods were accepted, except cold or dilute acid extractions. We only selected studies that measured metal speciation in soils and not in specific clays or oxides. According to Sauvé et al. [7], there is a large variation in the properties

of specific minerals as compared to whole soils. Natural soil data, and not data for artificially created soils or soils with sludge amendments, were carefully selected.

The soils also had to be characterized. The properties that were compiled include:

1. Soil pH
2. CEC and cations
3. Soil organic matter
4. Carbonates
5. Soil texture (% clays, silt and sand)
6. Soil type

Though not all the selected studies measured all these soil properties, the data were still used to increase the number of soil samples, making it possible to test the need to include all the soil properties to model Zn speciation with WHAM 6.0.

Only surface soils (depths between 0 and 30 cm) were selected (horizons Ap, Ah, etc.).

Selected studies are:

1. Gooddy *et al.* (1995)[134]
2. Lorenz *et al.* (1997)[135]
3. de Groot *et al.* (1998)[136]
4. Holm *et al.* (1998)[137]
5. Ge (1999)[63]
6. Wu *et al.* (2000)[74]
7. Aldrich *et al.* (2002)[76]
8. Catlett *et al.* (2002)[75]
9. Nolan *et al.* (2003)[72]
10. Dawson *et al.* (2006)[138]
11. Degryse *et al.* (2006)[139]
12. Meers *et al.* (2006)[111]
13. van Gestel (2008)[140]
14. Kim and Owens (2009)[141]
15. Kim *et al.* (2010)[142]
16. Mallmann *et al.* (2012)[144]
17. Muhammad *et al.* (2012)[145]
18. Rheinheimer dos Santos *et al.* (2013)[143]; Fernandez *et al.* (2007)[174]; Fernandez *et al.* (2010)[175]; Mallmann *et al.* (2012)[176]

### **A.1.3. Range of soil properties listed in the validation sample data**



A description of the main soil properties of the validation soil samples is presented in the following tables.

Tableau A.1 Range of soil properties listed in validation samples for labile Zn

Soil properties	Units	Minimum	Maximum	Median
Sand	%	29.8	98	81.2
Clay	%	0	30	6.4
Organic carbon	%	1.542	70.11	6.144
pH		3.73	7.47	6.34
CEC	cmol/kg	14.89	246.8	28.41
Carbonate content	% weight of CaCO <sub>3</sub>	0	3.05	0.636
Total Zn content	mg/kg	55.34	9179	500.2
Number of samples listing all soil properties: 28/32				

Tableau A.2 Range of soil properties listed in validation samples for soluble Zn

Soil properties	Units	Minimum	Maximum	Median
Sand	%	0	98	62.25
Clay	%	0	57	10
Organic carbon	%	0.172	70.1	5.18
pH		3.02	8.77	6.6
CEC	cmol/kg	0.26	671	15.6
Carbonate content	% weight of CaCO <sub>3</sub>	0	64	1.77
Total Zn content	mg/kg	0.5297	21 300	214.25
Number of samples listing all soil properties: 78/278				

Tableau A.3 Range of soil properties for the 78 samples selected for WHAM modeling for soluble Zn

Soil properties	Units	Minimum	Maximum	Median
Sand	%	0	94	60.3
Clay	%	0	52	10.2
Organic carbon	%	0.9	25.5	4.96
pH		3.6	8.3	6.82
CEC	cmol/kg	1.6	50.4	19.6
Carbonate content	% weight of CaCO <sub>3</sub>	0	26.6	0.636
Total Zn content	mg/kg	18	3988	310

## A.2. Assumptions made for WHAM 6.0 modeling

The table below presents the different assumptions made for WHAM 6.0 modeling. When more than one row is listed for a single study, more than one assumption was tested.

Tableau A.4 Assumptions for WHAM 6.0 parameterization with experimental soil data

Source	pH	Bulk density	Texture class	Particulate phases WHAM	OM	CEC	Carbonates
[151]	RD		TUSDA	D&C	TOC	[H+] : RD CEC- [H] = (Na 5%; Mg 15%; Al 5%; K 10%; Ca 65%)	Ctot-TOC
		K&H					
		PEDO					
Wu et al, 2000	RD		TUSDA	D&C	TOC	[H+] - RD ; CEC- [H] = Na 5%; Mg 15%; Al 5%; K 10%; Ca 65%	RD
		K&H					
		PEDO		OXI-Fe and Al			
Meers et al. (2006)	RD	K&H	TUSDA	D&C	RD	CEC- [H] = Na 5%; Mg 15%; Al 5%; K 10%; Ca 65%	RD
		PEDO					
Muhammad <i>et al.</i> 2012	RD	K&H	TUSDA	D&C	TOC	CEC- [H] = Na 5%; Mg 15%; Al 5%; K 10%; Ca 65%	RD
		PEDO					
Rheinheimer dos Santos et al, 2013	RD	RD	TUSDA	D&C	TOC	CEC – [H+]-[Ca] = Na 5%; Mg 75%; Al 5%; K 15%	RD
		K&H					
		PEDO		OXI-Fe			

The following paragraphs describe how the soil properties were converted to fit WHAM 6.0 input parameter requirements.

First, soil pH was used without any modification (as shown in Tableau A.4 above by RD-raw data).

Soil density was required in order to convert concentrations from mg/kg soil into mg/L. Two options were tested. In the first option (K&H), bulk density was calculated using the following relationship: Bulk density =  $1.38 + 0.0119\text{clay} + 0.0103\text{sand} - 0.00018\text{clay}^2 - 0.00008\text{sand}^2 - 0.00062\text{siltOM} - 0.00059\text{sandOM}$  [177]. For the second option (PEDO), bulk density was calculated using the tool from

[http://pedosphere.ca/resources/bulkdensity/worktable\\_us.cfm](http://pedosphere.ca/resources/bulkdensity/worktable_us.cfm) [178].

Texture class was obtained by matching the raw data (% sand, silt and clay) to the USDA texture triangle (stated as TUSDA in tableau A.4).

An estimation of the inorganic particulate phases that were input in WHAM 6.0 was made based on texture (stated as D&C in tableau A.4). According to Duchaufour (2001) and Calvet (2013), sand, silt and clay contain different proportions of quartz, silica, oxides and clay. Here we considered that sand contains 72.5% quartz, 18.5% silica, 9% iron oxides and 0% clay; silt contains 54% quartz, 22% silica, 13% iron oxides and 11% clay; clay contains 22% quartz, 11% silica, 9% iron oxides and 58% clay. As a first assumption, we considered that oxides were only iron oxides. We are conscious that this is a rough assumption, since Mn and Al oxides are also significant in soils. Whenever possible, we used raw oxide content data (stated as OXI in Table 4) [157, 179]. We agree that mass is not the same as available surface area. However, due to the lack of specific data at global scale, we used a rough estimate of the proportion of oxides, quartz and silica according to soil texture.

When total organic carbon was the raw data (stated as TOC in Tableau A.4), we transformed it into organic matter using the following relationship:  $OM = 1.72 * TOC$  [180]. Some authors considered that only a fraction of soil organic matter (SOM) is active and only this fraction should be taken into account to determine metal speciation in soil [95, 102, 108, 109, 181]. However, when modeling  $Cu^{2+}$  activity in soil solution, Ponizovsky et al. (2006) showed that considering AOM instead of SOM did not significantly improve model predictions [182]. So, like Ponizovsky et al. (2008) [114], we considered that all SOM could be active. We also assumed that SOM was composed only of humic and fulvic acids (HA and FA, respectively). Three assumptions on HA and FA proportions in OM were tested based on what had previously been used in the literature:

- 84-16 assumption:  $OM = 84\% HA + 16\% FA$  [108, 109, 114]
- CH assumption:  $OM = 70\% FA + 30\% HA$  if soil pH > 6.75; if not  $OM = 100\% FA$  [107]
- 100FA assumption:  $OM = 100\% FA$  [78]

CEC represents the maximum amount of cations that a soil can absorb for 100g of dry matter [157]. It is thus the sum of  $\text{Na}^+$ ,  $\text{Ca}^{2+}$ ,  $\text{Mg}^{2+}$ ,  $\text{K}^+$ ,  $\text{Al}^{3+}$  and  $\text{H}^+$  in  $\text{cmol}^+/\text{kg}$  or  $\text{meq}/100\text{gsoil}$  present in soil. We used the density of soil to convert 100g of soil into L. We then used the data in the table below to convert meq of cations into mg and then the molar mass to convert mg into mol.

Tableau A.5 Data for CEC conversion

Cations	Na	Ca	Mg	K	H	Al
Valence	1	2	2	1	1	3
Atomic weight	23	40	24	39	1	27
meq weight (mg/meq)	23	20	12	39	1	9

$\text{H}^+$  was given by pH and the rest of CEC was assumed to be composed of the other cations in the following proportions: Na 5%; Mg 15%; Al 5%; K 10%; Ca 65%. These proportions were fixed arbitrarily according to information found in Calvet (2003), which shows that in normal soils (as compared to acid and sodic soils), Ca and Mg are the dominant cations in CEC (between 80 and 90%), Na is more common in alkaline soils and Al in acids soils [179]. We are aware though that this assumption is not necessarily appropriate for all soils, since the proportion of cations may vary depending on whether soils are alkaline or acid and according to soil type. This may be corrected in a further study if a more complete data set becomes available on soil cationic composition at the global scale.

In order to maintain electroneutrality in the soil system, the same assumptions as Ponizovsky et al. (2008) were made:  $\text{Cl}^-$  and  $\text{SO}_4^{2-}$  concentrations with a molar ratio of 3:1[114].

In most of the studies used, carbonate content was directly published. When this was not the case, carbonates were estimated by subtracting TOC from total carbon (stated as  $\text{C}_{\text{tot}} - \text{TOC}$  in Table 4).

Römkens et al. (2004) [127] suggested the use DOC if available. We used the following relationship to obtain an estimate of DOC ( $\text{mgC/L}$ ) ( $R^2=0.68$ ):

$$\log \text{DOC} = 2.04 + 0.73 \cdot \log \text{OM} - 0.17 \text{pH}$$

We then converted DOC in DOM using  $OM=1.72*TOC$  [180].

In order to obtain dimensionless BF<sub>s</sub>, the following values of available water capacity of soils were used to convert L of soil solution into L of soil:

Tableau A.6 Available water capacity according to soil texture [183]

Soil type	Fraction (%)
Loamy sand	0.17
Sandy loam	0.2
Sandy clay loam	0.16
Loam	0.32
Silt loam	0.35
Silty clay loam	0.2
Clay loam	0.18
Silty clay	0.22
Clay	0.2
Peat	0.5
Sandy clay	0.125
Sand	0.1

### A.3. Empirical regressions used to obtain BF<sub>reg</sub>

The total reactive metal content of soil was obtained using Equation 4 from Rodrigues et al. [126]:

$$\log C_{\text{reactive}} = -1.9 + 1.1 \log C_{\text{tot}} + 0.11 pH + 0.55 \log \%OC$$

Equation 4. Empirical regression (R<sup>2</sup>=0.74) derived by Rodrigues et al. [126]

In Equation 4, C<sub>reactive</sub> and C<sub>tot</sub> represent total reactive and total Zn (mg/kg) in soil, respectively. Total reactive Zn, as specified by Rodrigues et al. [126], encompasses precipitates, sorbed ions on clays, SOM, amorphous metal oxides and carbonates and organometallic complexes. It constitutes a larger fraction than labile Zn and is obtained with an extraction with nitric acid (0.43M; 1:10 weight to volume ratio) [126].

Soluble concentration was calculated with Equation 5 from Groenenberg et al. [20]:

$$\log C_{\text{solution}} = -0.9 + 0.91 \cdot \log C_{\text{reactive}} + 0.69 \cdot \log \text{SOM}(\%) + 0.42 \cdot \log \text{clay}(\%) + 0.56 \cdot \log \text{DOC} \left( \frac{\text{mg}}{\text{L}} \right) - 0.3 \cdot \text{pH}$$

Equation 5. Empirical regression to obtain soluble Zn (R<sup>2</sup>=0.77) derived by Groenenberg et al. [20]

In Equation 5, C<sub>solution</sub> is soluble Zn (mol/L), and C<sub>reactive</sub> is total reactive Zn. DOC was estimated with the same regression as the one used for WHAM.

Free Zn is obtained using Equation 6 from Groenenberg et al. [149]:

$$\log C_{\text{free ion}} = 0.81 + 0.99 \cdot \log C_{\text{reactive}} - 0.5 \cdot \log \text{SOM}(\%) - 0.5 \cdot \text{pH}$$

Equation 6. Empirical regression to obtain free Zn (R<sup>2</sup>=0.8) derived by Groenenberg et al. [149]

In Equation 6, C<sub>free ion</sub> is free Zn (mol/L). C<sub>reactive</sub> is in mol/kg. Normally, this regression uses solution pH, but we used soil pH because soil solution pH is rarely available in the global soil database. Owsianiak et al.[19] made the same assumption.

#### **A.4. Testing empirical regression for soluble Zn from Groenenberg et al. (2010 and 2012)**

The first figure is the linear regression of C<sub>sol</sub> (experimental values) VS predicted C<sub>sol</sub> Groen (soluble concentration obtained using the following equation

$$\log C_{\text{solution}} = -0.81 + 0.99 \log C_{\text{reactive}} - 0.75 \log \text{SOM} - 0.5p$$

Equation 7. Empirical regression to obtain soluble Zn (R<sup>2</sup>=0.80) derived by Groenenberg et al. [149]

The second figure is with C<sub>sol</sub> Groen obtained with the following equation:

$$\log C_{\text{solution}} = -0.9 + 0.91 \log C_{\text{reactive}} + 0.69 \log \text{SOM} + 0.42 \log \text{clay} + 0.56 \log \text{DOC} - 0.3 \text{pH}$$

Equation 8. Empirical regression to obtain soluble Zn ( $R^2=0.77$ ) derived by Groenenberg et al.[20]

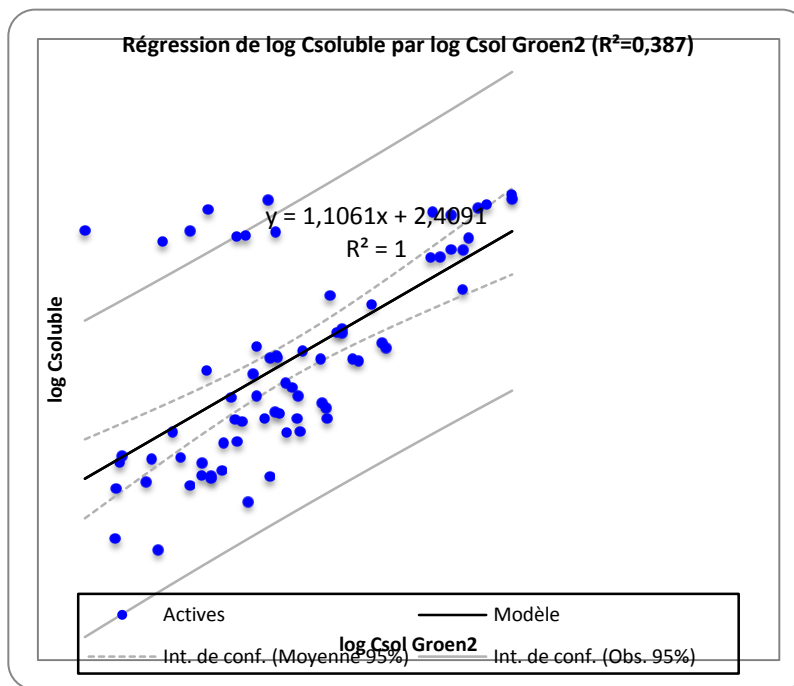


Figure A.4 Comparison between Csoluble (experimental data) and Csol Groen (obtained using equation 6)

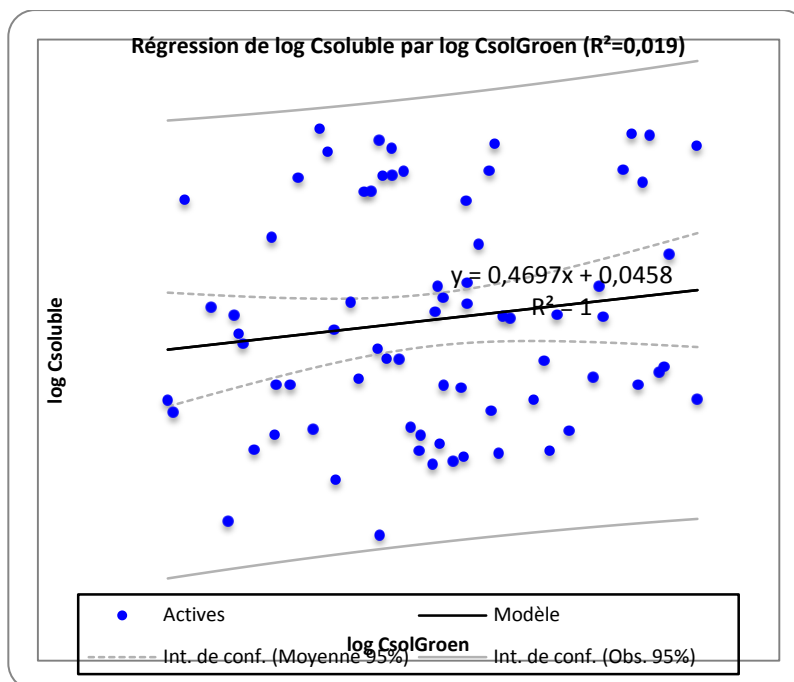


Figure A.5 Comparison between Csoluble (experimental data) and Csol Groen (obtained using equation 7)

Please note that total Zn was used instead of reactive Zn because experimental data measured only total Zn. This was also done for some data used by Groenenberg et al. when reactive Zn was not available [20, 149]. The results indicate that empirical regressions are not easy to replicate, even when soils used fall in the same range.

## A.5. Inclusion of DOC in modeling

The results in this figure indicate the differences when including and excluding DOC as an input parameter in WHAM 6.0 speciation modeling.



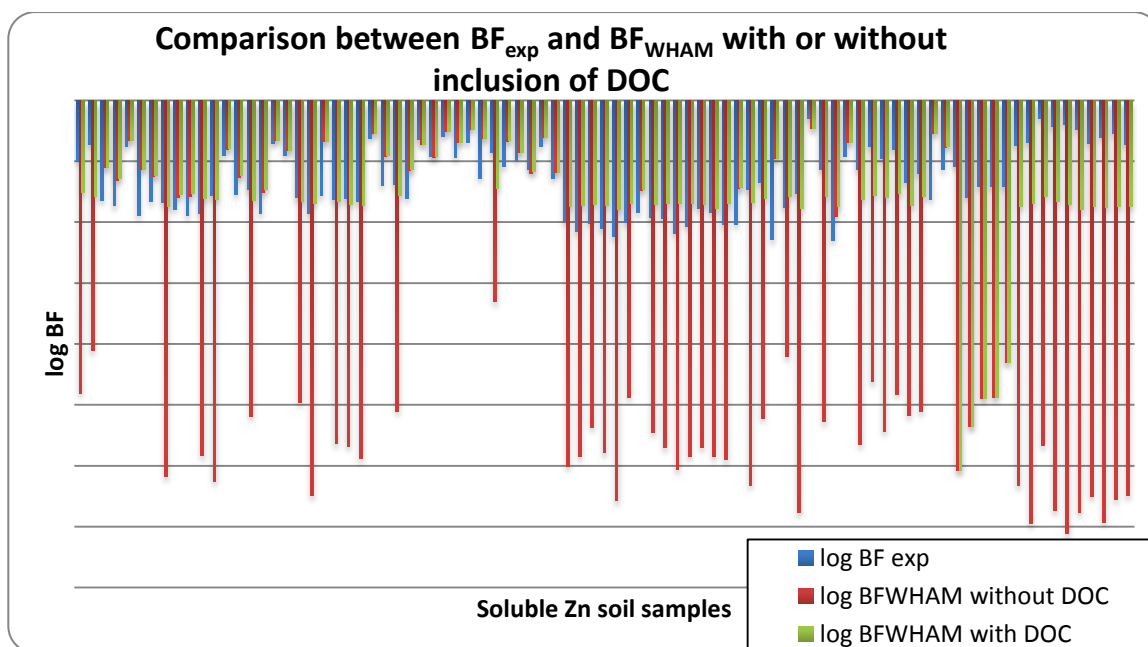


Figure A.6 Comparison of  $BF_{exp}$  and  $BF_{WHAM}$  with and without the inclusion of DOC for soluble Zn soil samples

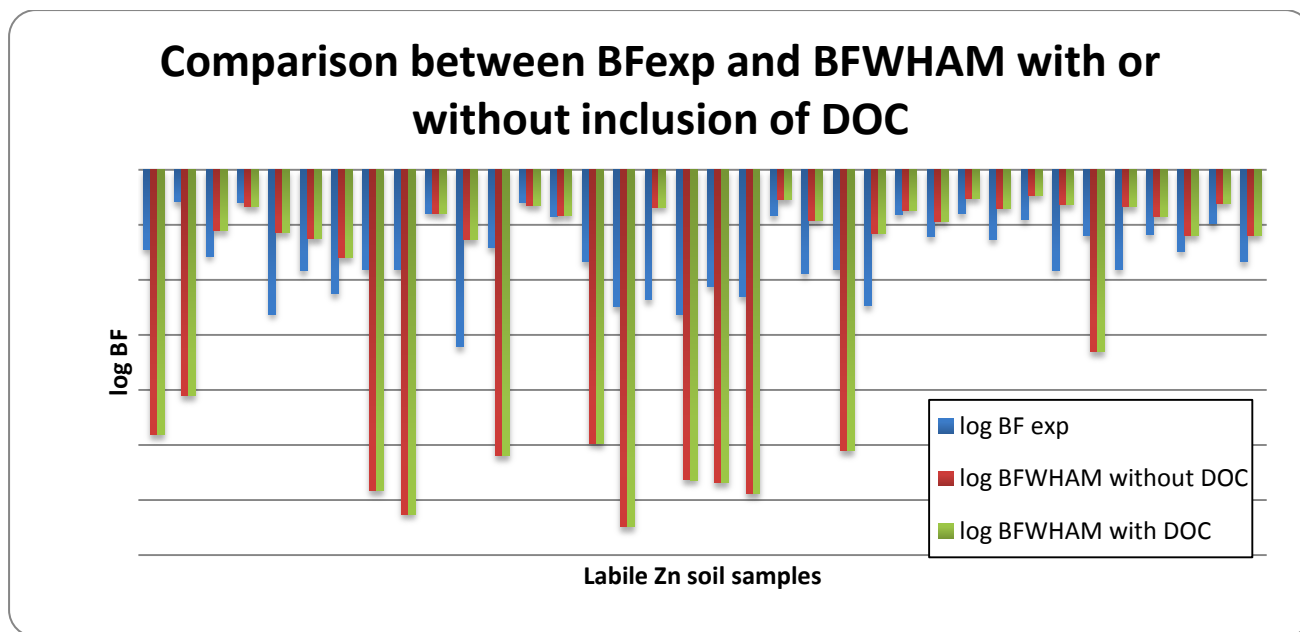


Figure A.7 Comparison between BF<sub>exp</sub> and BF<sub>WHAM</sub> with and without the inclusion of DOC for Labile Zn

## A.6. Results from linear regressions to determine the main soil properties influencing zinc speciation

Results from multiple linear regressions and individual linear regressions are presented in the tables below. The insignificant parameters ( $Pr>|t| > 0.05$ ) are highlighted in red.

Tableau A.7 Results for multiple linear regressions for soluble Zn

	Coefficients multiple linear regressions								n	R <sup>2</sup> <sub>adj</sub>	RMS E
	Constant	log (tot Zn)	pH	log (OM)	log (clay)	log (CEC)	log (sand)	log (carbonates)			
log (sol Zn)	-2.93	1.10							78	0.24	1.12
log (sol Zn)	0.10	1.25	-						78	0.40	0.99
log (sol Zn)	0.07	1.18	-	0.54	0.53				78	0.41	0.99
log (sol Zn)	0.26	1.10	-	0.39	0.59	-0.97			78	0.48	0.92
log (sol Zn)	0.77	1.30	-	0.40	0.56	-0.82	-0.93		78	0.55	0.86
log (sol Zn)	-2.05	1.34	-	0.39	0.73	-0.02	-0.79	0.97	78	0.62	0.79
<b>log (sol Zn)</b>	<b>-0.67</b>	<b>1.32</b>	<b>0.73</b>	<b>0.60</b>	<b>0.11</b>	<b>-0.85</b>	<b>1.26</b>	<b>1.21</b>	<b>78</b>	<b>0.68</b>	<b>0.73</b>
log (sol Zn)	2.43		-						78	0.09	1.22

Zn)			0.39									
log (sol Zn)	-0.70			0.71						78	0.03	1.27
log (sol Zn)	1.29				-1.37					78	0.18	1.16
log (sol Zn)	0.37					-0.49				78	0.01	1.28
log (sol Zn)	-2.04						1.17			78	0.20	1.15
log (sol Zn)	-0.02							-0.42		78	0.01	1.28
log (sol Zn)	-1.60	0.47								27 8	0.10	1.12
log (sol Zn)	0.70		- 0.19							27 8	0.04	1.15
log (sol Zn)	-1.04			0.71						27 8	0.05	1.15
log (sol Zn)	0.39				-1.00					24 0	0.11	1.14
log (sol Zn)	0.13					-0.30				21 8	0.03	1.00
log (sol Zn)	-1.89						0.68			13 2	0.03	1.41
log (sol Zn)	-0.51							-0.05		15 6	- 0.01	1.43

According to multiple linear regression results (see Tableau A.7), the most influent properties for soluble Zn are total Zn, pH, CEC, OM, sand and carbonate contents. The influence of clay was not significant. This is not surprising since OM, clay and CEC are correlated [157], However, when looking at linear regressions (without taking correlation into account, but covering more variety in soil types), clay is becomes significant but carbonate content does not.

Tableau A.8 Results for multiple linear regressions for labile Zn

	Coefficients multiple linear regressions								n	R <sup>2</sup> <sub>adj</sub>	RMS E
	Constant	log (tot Zn)	pH	log (OM)	log (clay)	log (CEC)	log (sand)	log (carbonates)			
log (labile Zn)	-5.43	1.88							28	0.43	1.26
log (labile Zn)	1.92	2.09	- 1.28						28	0.78	0.79
log (labile Zn)	1.63	2.24	- 1.17	-1.12					28	0.80	0.76
log (labile Zn)	1.60	2.24	- 1.14	-1.14	-0.19				28	0.79	0.77
log (labile Zn)	2.97	2.22	- 1.20	-0.79	-0.07	-0.92			28	0.78	0.78
log (labile Zn)	6.10	2.25	- 1.24	-1.16	-0.56	-0.06	-1.89		28	0.78	0.78

log (labile Zn)	6.21	2.25	1.26	-	-1.16	-0.51	-0.19	-1.85	0.19	2 8	0.77	0.80
log (labile Zn)	6.27		1.06	-						2 8	0.21	1.49
log (labile Zn)	-0.03				-0.46					2 8	-	1.70
log (labile Zn)	0.30					-0.79				2 8	0.01	1.67
log (labile Zn)	0.35						-0.49			2 8	-	1.70
log (labile Zn)	-5.47							2.79		2 8	0.02	1.66
log (labile Zn)	-0.16								-0.80	2 8	-	1.70
log (labile Zn)	-4.45	1.47								3 6	0.27	1.35
log (labile Zn)	4.10		0.74	-						3 6	0.19	1.43
log (labile Zn)	0.00				-0.52					3 6	-	1.59
log (labile Zn)	0.16					-0.72				3 2	0.02	1.61
log (labile Zn)	0.79						-0.79			3 2	-	1.64
log (labile Zn)	-6.17							3.14		3 2	0.04	1.58
log (labile Zn)	-0.26								-0.69	3 6	-	1.60

According to Tableau A.8, pH was the only significant parameter for labile Zn. However, for labile Zn, the number of samples used in regressions was quite low, and this could explain the minimal significance of other soil parameters.

For these reasons, all of the properties were kept when defining the soil archetypes. In total, 51 soil archetypes of the possible 1 053 mathematical combinations were created with selected experimental soil samples (see listing below).

## A.7. Subgroups considered for the preliminary versions of the archetypes

To create the soil archetypes, all possible combinations of experimental values for the subgroups presented in the table below were selected.

Tableau A.9 Criteria for the creation of subgroups at the basis of archetype definition

Soil texture (USDA)	pH (H <sub>2</sub> O) [107]	OM (%) [184]	CaCO <sub>3</sub> (%) [185]	CEC [186]
Clay (heavy)	Acid < 6.75	Low < 4	Not calcareous < 5	Low <9
Silty clay				
Clay				
Silty clay loam				
Clay loam				
Silt	Neutral 6.75 – 7.2	Moderate 4-9	Low-moderately calcareous 5-25	Moderate 9-15
Silt loam				
Sandy clay				
Loam				
Sandy clay loam				
Sandy loam	Basic > 7.2	High > 9	Highly calcareous >25	High >15
Loamy sand				
Sand				
Humus-bearing				
Peat soils				

For texture, we used the different soil texture groups from USDA [159]. For soil pH, we used the same cut-off as Cloutier-Hurteau et al. [107] in order to be coherent with OM assumptions. For OM and carbonate contents as well as CEC, we used cut-off established in agriculture to define organic matter levels in soils, carbonate content in soils and CEC in soils [184-186].

## A.8. Archetypes for experimental soils

Tableau A.10 Archetypes created with experimental soil data

Archetype	Soil texture (USDA)	pH (H2O) [12]	OM (%) [77]	CaCO3 (%) [78]	CEC [79]
1	Silty clay	Basic > 7.2	High > 9	Not calcareous < 5	High>15
2	Silty clay	Basic > 7.2	High > 9	Low-moderately calcareous 5-25	High>15
3	Clay	Acid <6.75	Low<4	Not calcareous < 5	High>15
4	Silty clay loam	Basic > 7.2	Low<4	Low-moderately calcareous 5-25	High>15
5	Silty clay loam	Basic > 7.2	Moderate 4-9	Low-moderately calcareous 5-25	Moderate 9-15
6	Silty clay loam	Basic > 7.2	Moderate 4-9	Low-moderately calcareous 5-25	High>15
7	Silty clay loam	Basic > 7.2	High > 9	Low-moderately calcareous 5-25	High>15
8	Clay loam	Neutral 6.75-7.2	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	High>15
9	Clay loam	Basic > 7.2	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	High>15
10	Clay loam	Basic > 7.2	Moderate 4-9	Low-moderately calcareous 5-25	High>15
11	Clay loam	Basic > 7.2	High > 9	Highly calcareous >25	High>15
12	Silt loam	Acid <6.75	Low<4	Not calcareous < 5	Low <9
13	Silt loam	Acid <6.75	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	Low <9
14	Silt loam	Basic > 7.2	Low<4	Not calcareous < 5	High>15
15	Loam	Acid <6.75	Low<4	Not calcareous < 5	High>15
16	Loam	Acid <6.75	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	Low <9
17	Loam	Acid <6.75	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	High>15
18	Loam	Acid <6.75	High > 9	Not calcareous < 5	High>15
19	Loam	Neutral 6.75-7.2	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	High>15
20	Loam	Basic > 7.2	Low<4	Not calcareous < 5	Moderate 9-15
21	Loam	Basic > 7.2	Low<4	Low-moderately calcareous 5-25	Moderate 9-15
22	Loam	Basic > 7.2	Moderate 4-9	Low-moderately calcareous 5-25	High>15
23	Sandy loam	Acid <6.75	Low<4	Not calcareous < 5	Low <9
24	Sandy loam	Acid <6.75	Low<4	Not calcareous < 5	High>15
25	Sandy loam	Acid <6.75	High > 9	Not calcareous < 5	Low <9
26	Sandy loam	Neutral 6.75-	Low<4	Not calcareous < 5	Low <9

		7.2			
27	Sandy loam	Neutral 6.75-7.2	Low<4	Not calcareous < 5	High>15
28	Sandy loam	Neutral 6.75-7.2	High > 9	Not calcareous < 5	Low <9
29	Sandy loam	Basic > 7.2	Low<4	Not calcareous < 5	Low <9
30	Sandy loam	Basic > 7.2	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	Low <9
31	Sandy loam	Basic > 7.2	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	High>15
32	Sandy loam	Basic > 7.2	Moderate 4-9	Low-moderately calcareous 5-25	Low <9
33	Sandy loam	Basic > 7.2	High > 9	Not calcareous < 5	Low <9
34	Sandy loam	Basic > 7.2	High > 9	Not calcareous < 5	High>15
35	Sandy loam	Basic > 7.2	High > 9	Low-moderately calcareous 5-25	Low <9
36	Loamy sand	Acid <6.75	Low<4	Not calcareous < 5	Low <9
37	Loamy sand	Acid <6.75	Low<4	Not calcareous < 5	High>15
38	Loamy sand	Acid <6.75	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	Low <9
39	Loamy sand	Acid <6.75	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	High>15
40	Loamy sand	Acid <6.75	High > 9	Not calcareous < 5	High>15
41	Sand	Acid <6.75	Low<4	Not calcareous < 5	Moderate 9-15
42	Sand	Acid <6.75	Low<4	Not calcareous < 5	High>15
43	Sand	Acid <6.75	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	Low <9
44	Sand	Acid <6.75	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	High>15
45	Sand	Acid <6.75	High > 9	Not calcareous < 5	High>15
46	Humus-bearing 15-30	Acid <6.75	High > 9	Not calcareous < 5	Low <9
47	Humus-bearing 15-30	Neutral 6.75-7.2	High > 9	Not calcareous < 5	Moderate 9-15
48	Humus-bearing 15-30	Basic > 7.2	High > 9	Not calcareous < 5	Moderate 9-15
49	Humus-bearing 15-30	Basic > 7.2	High > 9	Not calcareous < 5	High>15
50	Peat soils>30	Acid <6.75	High > 9	Not calcareous < 5	High>15
51	Peat soils>30	Neutral 6.75-7.2	High > 9	Not calcareous < 5	High>15

## A.9. HWSD statistics

The main soil properties listed in HWSD are described in the table below.

Tableau A.11 Range of soil properties listed in HWSD

Soil properties	Units	Minimum	Maximum	Median
Sand	%	0	100	43
Silt	%	0	86	29
Clay	%	0	94	22
Bulk density	kg/dm <sup>3</sup>	1.1	1.96	1.4
Organic carbon	%	0	47.24	0.87
Dissolved organic carbon	mgC/L	0	718.1	14.19
pH		3	10.6	6.4
CEC	cmol/kg	0	215	13
Base saturation	% of CEC	1	100	87
Carbonate content	% weight of CaCO <sub>3</sub>	0	91.4	0.2
Total exchangeable Na	%	0	100	2
Zn background concentration	mg/kg	41	78.5	54

To model speciation with WHAM 6.0, the data must be adapted to meet model requirements in terms of input parameters. Below is a description of the different assumptions.

Tableau A.12 Assumptions for WHAM 6.0 speciation modeling for HWSD soil data

Source	Bulk density	Texture	Texture WHAM	pH	OM	CEC	Carbonates
HWSD	1st RD 2nd K&H 3rd K&H-OM 4th HIST	TUSDA	D&C	RD	TOC	$[Al] = CEC - BS - [H]$ ; Na:RD $Ca + Mg + K = BS - Na =$ Ca 85%, Mg 10% and K 5%	RD

### *Zn background concentration*

We estimated a Zn natural background concentration based on soil texture. We made the following assumptions based on Kabata-Pendias (2007)[70]:



The clay (heavy) (1), silty clay (2), clay (3) and silty clay loam (4) USDA textural classes fall in the “heavy loamy” Kabata-Pendias and Mukherjee (2007) category and have a background concentration of 55 mg/kg.

The clay loam (5), silt (6), silt loam (7), sandy clay (8) and loam (9) USDA textural classes fall in the “medium loamy” Kabata-Pendias and Mukherjee (2007) category and have a background concentration of 54 mg/kg.

The sandy clay loam (10), sandy loam (11), loamy sand (12) and sand (13) USDA textural classes fall in the “light sand” Kabata-Pendias and Mukherjee (2007) category and have a background concentration of 41 mg/kg.

Soils with over 10%  $\text{CaCO}_3$  [187] were considered calcareous soils with a background concentration of 78.5 mg/kg.

Soils with less than 60% clay content and over 12% total organic carbon and soils with over 60% clay content and over 18% total organic carbon content were considered organic soils along with all histosols[188]. They were attributed a background concentration of 75 mg/kg.

We first attributed background concentrations to calcareous and organic soils and then used the other assumptions for the remaining soil samples.

To this, we also considered a previous emission level of 1 gZn/l of soil, which represents background anthropogenic emission levels between 510 mg/kg and 1176 mg/kg (mean 718 mg/kg) according to bulk density of soil. These emission levels fall in the range of anthropogenic emission levels according to [70]. In fact, non ferric smelters and contaminated sites contain between 443 and 1112 mg/kg of Zn and the average concentration of Zn in sludge for EU is around 811 mg/kg.

### A.10. $BF_{WHAM}$ calculation with WHAM 6.0.

The spread (in orders of magnitude) of  $BF_{WHAM}$  and  $BF_{reg}$  compared to  $BF_{exp}$  for soluble and labile Zn.

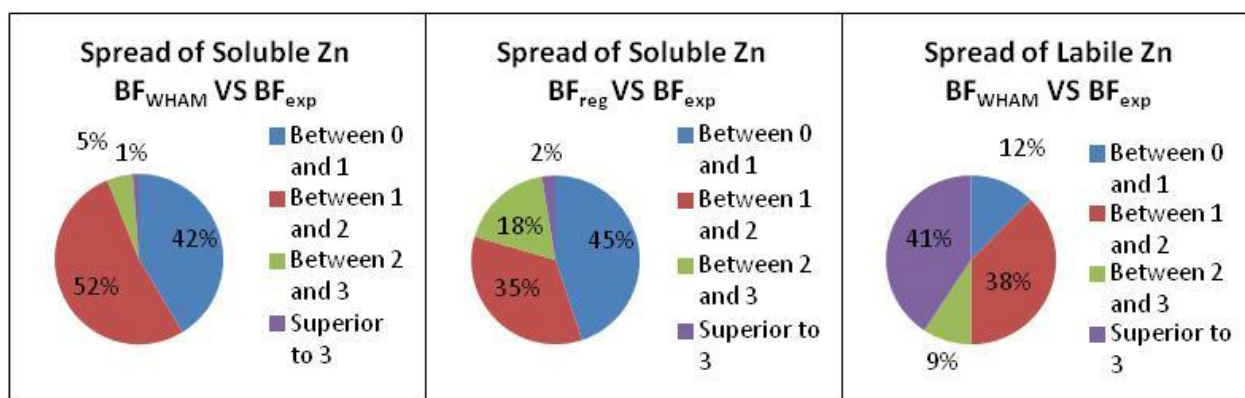


Figure A.8 Spread in orders of magnitude of  $BF_{WHAM}$  and  $BF_{reg}$  as compared to  $BF_{exp}$  for soluble and labile Zn

### A.11. HWSD soil archetypes

The table below presents the soil archetypes represented by the HWSD soil samples. In the table, “NV” stands for “not part of validation”. Archetypes were also related to the FAO soil classification [159].

Tableau A.13 HWSD soil archetypes with final validation verdict

Archetype	Soil Texture (USDA)	pH (H <sub>2</sub> O) [12]	OM (%) [77]	CaCO <sub>3</sub> (%) [78]	CEC [79]	Validation final verdict
1	Silty clay	Basic > 7.2	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	High > 15	Valid
3	Clay	Acid < 6.75	Low < 4	Not calcareous < 5	High > 15	Valid
4	Silty clay loam	Basic > 7.2	Low < 4	Low-moderately calcareous 5-25	High > 15	Invalid * (2,65)
8	Clay	Neutral	Moderate	Not	High > 15	Valid

	loam	6.75-7.2	4-9	calcareous < 5		
9	Clay loam	Basic > 7.2	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	High>15	Valid (soluble) Invalid (labile)
10	Clay loam	Basic > 7.2	Moderate 4-9	Low-moderately calcareous 5-25	High>15	Valid
12	Silt loam	Acid <6.75	Low<4	Not calcareous < 5	Low <9	Valid
14	Silt loam	Basic > 7.2	Low<4	Not calcareous < 5	High>15	Valid
15	Loam	Acid <6.75	Low<4	Not calcareous < 5	High>15	Valid (soluble) Invalid (labile 1/2)*
16	Loam	Acid <6.75	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	Low <9	Valid
17	Loam	Acid <6,75	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	High>15	Valid
18	Loam	Acid <6.75	High >9	Not calcareous < 5	High>15	Valid (soluble) Invalid (labile)
19	Loam	Neutral 6.75-7.2	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	High>15	Valid (soluble) Invalid (labile 1/2)*
20	Loam	Basic > 7.2	Low<4	Not calcareous < 5	Moderate 9-15	Valid
21	Loam	Basic > 7.2	Low<4	Low-moderately calcareous 5-25	Moderate 9-15	Valid
22	Loam	Basic > 7.2	Moderate 4-9	Low-moderately calcareous 5-25	High>15	Valid
23	Sandy loam	Acid <6.75	Low<4	Not calcareous	Low <9	Valid

				< 5		
24	Sandy loam	Acid <6.75	Low<4	Not calcareous < 5	High>15	Valid
26	Sandy loam	Neutral 6.75-7.2	Low<4	Not calcareous < 5	Low <9	Valid
27	Sandy loam	Neutral 6.75-7.2	Low<4	Not calcareous < 5	High>15	Invalid (2.1)
29	Sandy loam	Basic > 7.2	Low<4	Not calcareous < 5	Low <9	Valid
36	Loamy sand	Acid <6.75	Low<4	Not calcareous < 5	Low <9	Valid
37	Loamy sand	Acid <6.75	Low<4	Not calcareous < 5	High>15	Valid
38	Loamy sand	Acid <6.75	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	Low <9	Valid
39	Loamy sand	Acid <6.75	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	High>15	Valid (soluble) Invalid (2/5 at 2.4 and 2.63)
40	Loamy sand	Acid <6.75	High >9	Not calcareous < 5	High>15	Valid (soluble) Invalid (labile)
41	Sand	Acid <6.75	Low<4	Not calcareous < 5	Moderate 9-15	Valid
43	Sand	Acid <6.75	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	Low <9	Valid
50	Peat soils	Acid <6.75	High >9	Not calcareous < 5	High>15	Valid (soluble) Invalid (labile)
52	Clay (heavy)	Acid <6.75	Low<4	Not calcareous < 5	Low <9	NV
53	Clay (heavy)	Acid <6.75	Low<4	Not calcareous < 5	Moderate 9-15	NV

54	Clay (heavy)	Acid <6.75	Low<4	Not calcareous < 5	High>15	NV
55	Clay (heavy)	Acid <6.75	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	Moderate 9-15	NV
56	Clay (heavy)	Acid <6.75	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	High>15	NV
57	Clay (heavy)	Acid <6.75	High >9	Not calcareous < 5	High>15	NV
58	Clay (heavy)	Neutral 6.75-7.2	Low<4	Not calcareous < 5	Moderate 9-15	NV
59	Clay (heavy)	Neutral 6.75-7.2	Low<4	Not calcareous < 5	High>15	NV
60	Clay (heavy)	Neutral 6.75-7.2	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	High>15	NV
61	Clay (heavy)	Basic > 7.2	Low<4	Not calcareous < 5	Moderate 9-15	NV
62	Clay (heavy)	Basic > 7.2	Low<4	Not calcareous < 5	High>15	NV
63	Clay (heavy)	Basic > 7.2	Low<4	Low-moderately calcareous 5-25	High>15	NV
64	Clay (heavy)	Basic > 7.2	Low<4	Highly calcareous >25	High>15	NV
65	Clay (heavy)	Basic > 7.2	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	High>15	NV
66	Silty clay	Acid <6.75	Low<4	Not calcareous < 5	Low <9	NV
67	Silty clay	Acid <6.75	Low<4	Not calcareous < 5	Moderate 9-15	NV

68	Silty clay	Acid <6.75	Low<4	Not calcareous < 5	High>15	NV
69	Silty clay	Acid <6.75	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	Moderate 9-15	NV
70	Silty clay	Acid <6.75	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	High>15	NV
71	Silty clay	Acid <6.75	High >9	Not calcareous < 5	High>15	NV
72	Silty clay	Neutral 6.75-7.2	Low<4	Not calcareous < 5	High>15	NV
73	Silty clay	Neutral 6.75-7.2	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	High>15	NV
74	Silty clay	Neutral 6.75-7.2	Moderate 4-9	Low-moderately calcareous 5-25	High>15	NV
75	Silty clay	Basic > 7.2	Low<4	Not calcareous < 5	Moderate 9-15	NV
76	Silty clay	Basic > 7.2	Low<4	Not calcareous < 5	High>15	NV
77	Silty clay	Basic > 7.2	Low<4	Low-moderately calcareous 5-25	Moderate 9-15	NV
78	Silty clay	Basic > 7.2	Low<4	Low-moderately calcareous 5-25	High>15	NV
79	Silty clay	Basic > 7.2	Moderate 4-9	Low-moderately calcareous 5-25	High>15	NV
80	Silty clay	Basic > 7.2	Moderate 4-9	Highly calcareous >25	High>15	NV

81	Clay	Acid <6.75	Low<4	Not calcareous < 5	Low <9	NV
82	Clay	Acid <6.75	Low<4	Not calcareous < 5	Moderate 9-15	NV
83	Clay	Acid <6.75	Low<4	Highly calcareous >25	High>15	NV
84	Clay	Acid <6.75	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	Low <9	NV
85	Clay	Acid <6.75	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	Moderate 9-15	NV
86	Clay	Acid <6.75	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	High>15	NV
87	Clay	Acid <6.75	Moderate 4-9	Highly calcareous >25	High>15	NV
88	Clay	Acid <6.75	High >9	Not calcareous < 5	High>15	NV
89	Clay	Neutral 6.75- 7.2	Low<4	Not calcareous < 5	Low <9	NV
90	Clay	Neutral 6.75- 7.2	Low<4	Not calcareous < 5	Moderate 9-15	NV
91	Clay	Neutral 6.75- 7.2	Low<4	Not calcareous < 5	High>15	NV
92	Clay	Neutral 6.75- 7.2	Low<4	Low- moderately calcareous 5-25	High>15	NV
93	Clay	Neutral 6.75- 7.2	Low<4	Highly calcareous >25	High>15	NV
94	Clay	Neutral 6.75- 7.2	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	Moderate 9-15	NV

95	Clay	Neutral 6.75- 7.2	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	High>15	NV
96	Clay	Basic > 7.2	Low<4	Not calcareous < 5	Moderate 9-15	NV
97	Clay	Basic > 7.2	Low<4	Not calcareous < 5	High>15	NV
98	Clay	Basic > 7.2	Low<4	Low- moderately calcareous 5-25	High>15	NV
99	Clay	Basic > 7.2	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	Moderate 9-15	NV
100	Clay	Basic > 7.2	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	High>15	NV
101	Clay	Basic > 7.2	Moderate 4-9	Low- moderately calcareous 5-25	High>15	NV
102	Silty clay loam	Acid <6.75	Low<4	Not calcareous < 5	Low <9	NV
103	Silty clay loam	Acid <6.75	Low<4	Not calcareous < 5	Moderate 9-15	NV
104	Silty clay loam	Acid <6.75	Low<4	Not calcareous < 5	High>15	NV
105	Silty clay loam	Acid <6.75	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	Low <9	NV
106	Silty clay loam	Acid <6.75	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	Moderate 9-15	NV
107	Silty clay loam	Acid <6.75	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	High>15	NV
108	Silty clay	Acid <6.75	High >9	Not calcareous	Moderate 9-15	NV



	loam			< 5		
109	Silty clay loam	Acid <6.75	High >9	Not calcareous < 5	High>15	NV
110	Silty clay loam	Neutral 6.75-7.2	Low<4	Not calcareous < 5	High>15	NV
111	Silty clay loam	Neutral 6.75-7.2	Low<4	Low-moderately calcareous 5-25	High>15	NV
112	Silty clay loam	Neutral 6.75-7.2	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	High>15	NV
113	Silty clay loam	Basic > 7.2	Low<4	Not calcareous < 5	Low <9	NV
114	Silty clay loam	Basic > 7.2	Low<4	Not calcareous < 5	Moderate 9-15	NV
115	Silty clay loam	Basic > 7.2	Low<4	Not calcareous < 5	High>15	NV
116	Silty clay loam	Basic > 7.2	Low<4	Low-moderately calcareous 5-25	Moderate 9-15	NV
117	Silty clay loam	Basic > 7.2	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	High>15	NV
118	Clay loam	Acid <6.75	Low<4	Not calcareous < 5	Low <9	NV
119	Clay loam	Acid <6.75	Low<4	Not calcareous < 5	Moderate 9-15	NV
120	Clay loam	Acid <6.75	Low<4	Not calcareous < 5	High>15	NV
121	Clay loam	Acid <6.75	Low<4	Low-moderately calcareous 5-25	High>15	NV

122	Clay loam	Acid <6.75	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	Moderate 9-15	NV
123	Clay loam	Acid <6.75	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	High>15	NV
124	Clay loam	Acid <6.75	High >9	Not calcareous < 5	High>15	NV
125	Clay loam	Neutral 6.75-7.2	Low<4	Not calcareous < 5	Moderate 9-15	NV
126	Clay loam	Neutral 6.75-7.2	Low<4	Not calcareous < 5	High>15	NV
127	Clay loam	Neutral 6.75-7.2	Low<4	Low-moderately calcareous 5-25	High>15	NV
128	Clay loam	Basic > 7.2	Low<4	Not calcareous < 5	Low <9	NV
129	Clay loam	Basic > 7.2	Low<4	Not calcareous < 5	Moderate 9-15	NV
130	Clay loam	Basic > 7.2	Low<4	Not calcareous < 5	High>15	NV
131	Clay loam	Basic > 7.2	Low<4	Low-moderately calcareous 5-25	Moderate 9-15	NV
132	Clay loam	Basic > 7.2	Low<4	Low-moderately calcareous 5-25	High>15	NV
133	Clay loam	Basic > 7.2	Low<4	Highly calcareous >25	Moderate 9-15	NV
134	Clay loam	Basic > 7.2	Low<4	Highly calcareous >25	High>15	NV
135	Clay	Basic >	High >9	Low-	High>15	NV

	loam	7.2		moderately calcareous 5-25		
136	Silt	Acid <6.75	Low<4	Not calcareous < 5	Low <9	NV
137	Silt loam	Acid <6.75	Low<4	Not calcareous < 5	Moderate 9-15	NV
138	Silt loam	Acid <6.75	Low<4	Not calcareous < 5	High>15	NV
139	Silt loam	Acid <6.75	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	Moderate 9-15	NV
140	Silt loam	Acid <6.75	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	High>15	NV
141	Silt loam	Acid <6.75	High >9	?	High>15	NV
142	Silt loam	Acid <6.75	High >9	Not calcareous < 5	High>15	NV
143	Silt loam	Neutral 6.75- 7.2	Low<4	Not calcareous < 5	Low <9	NV
144	Silt loam	Neutral 6.75- 7.2	Low<4	Not calcareous < 5	High>15	NV
145	Silt loam	Neutral 6.75- 7.2	Low<4	Low- moderately calcareous 5-25	High>15	NV
146	Silt loam	Neutral 6.75- 7.2	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	High>15	NV
147	Silt loam	Neutral 6.75- 7.2	Moderate 4-9	Low- moderately calcareous 5-25	High>15	NV
148	Silt loam	Basic > 7.2	Low<4	Not calcareous < 5	Low <9	NV

149	Silt loam	Basic > 7.2	Low<4	Not calcareous < 5	Moderate 9-15	NV
150	Silt loam	Basic > 7.2	Low<4	Low-moderately calcareous 5-25	Moderate 9-15	NV
151	Silt loam	Basic > 7.2	Low<4	Low-moderately calcareous 5-25	High>15	NV
152	Sandy clay	Acid <6.75	Low<4	Not calcareous < 5	Low <9	NV
153	Sandy clay	Acid <6.75	Low<4	Not calcareous < 5	Moderate 9-15	NV
154	Sandy clay	Acid <6.75	Low<4	Not calcareous < 5	High>15	NV
155	Sandy clay	Acid <6.75	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	Moderate 9-15	NV
156	Sandy clay	Acid <6.75	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	High>15	NV
157	Sandy clay	Acid <6.75	High >9	Not calcareous < 5	Moderate 9-15	NV
158	Sandy clay	Neutral 6.75-7.2	Low<4	Not calcareous < 5	Low <9	NV
159	Sandy clay	Neutral 6.75-7.2	Low<4	Not calcareous < 5	Moderate 9-15	NV
160	Sandy clay	Neutral 6.75-7.2	Low<4	Not calcareous < 5	High>15	NV
161	Sandy clay	Neutral 6.75-7.2	Low<4	Low-moderately calcareous 5-25	High>15	NV
162	Sandy	Basic >	Low<4	Not	Moderate	NV

	clay	7.2		calcareous < 5	9-15	
163	Sandy clay	Basic > 7.2	Low<4	Not calcareous < 5	High>15	NV
164	Sandy clay	Basic > 7.2	Low<4	Low- moderately calcareous 5-25	High>15	NV
165	Sandy clay	Basic > 7.2	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	High>15	NV
166	Loam	Acid <6.75	Low<4	Not calcareous < 5	Low <9	NV
167	Loam	Acid <6.75	Low<4	Not calcareous < 5	Moderate 9-15	NV
168	Loam	Acid <6.75	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	Moderate 9-15	NV
169	Loam	Acid <6.75	Moderate 4-9	Low- moderately calcareous 5-25	High>15	NV
170	Loam	Acid <6.75	High >9	Not calcareous < 5	Moderate 9-15	NV
171	Loam	Neutral 6.75- 7.2	Low<4	Not calcareous < 5	Low <9	NV
172	Loam	Neutral 6.75- 7.2	Low<4	Not calcareous < 5	Moderate 9-15	NV
173	Loam	Neutral 6.75- 7.2	Low<4	Not calcareous < 5	High>15	NV
174	Loam	Neutral 6.75- 7.2	Low<4	Low- moderately calcareous 5-25	Low <9	NV
175	Loam	Neutral 6.75-	Low<4	Low- moderately	High>15	NV

		7.2		calcareous 5-25		
176	Loam	Basic > 7.2	Low<4	Not calcareous < 5	Low <9	NV
177	Loam	Basic > 7.2	Low<4	Not calcareous < 5	High>15	NV
178	Loam	Basic > 7.2	Low<4	Low- moderately calcareous 5-25	Low <9	NV
179	Loam	Basic > 7.2	Low<4	Low- moderately calcareous 5-25	High>15	NV
180	Loam	Basic > 7.2	Low<4	Highly calcareous >25	Low <9	NV
181	Loam	Basic > 7.2	Low<4	Highly calcareous >25	Moderate 9-15	NV
182	Loam	Basic > 7.2	Low<4	Highly calcareous >25	High>15	NV
183	Loam	Basic > 7.2	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	Moderate 9-15	NV
184	Loam	Basic > 7.2	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	High>15	NV
185	Loam	Basic > 7.2	High >9	Low- moderately calcareous 5-25	High>15	
186	Sandy clay loam	Acid <6.75	Low<4	Not calcareous < 5	Low <9	NV
187	Sandy clay loam	Acid <6.75	Low<4	Not calcareous < 5	Moderate 9-15	NV
188	Sandy clay	Acid <6.75	Low<4	Not calcareous	High>15	NV

	loam			< 5		
189	Sandy clay loam	Acid <6.75	Low<4	Low-moderately calcareous 5-25	Moderate 9-15	NV
190	Sandy clay loam	Acid <6.75	Low<4	Low-moderately calcareous 5-25	High>15	NV
191	Sandy clay loam	Acid <6.75	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	Low <9	NV
192	Sandy clay loam	Acid <6.75	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	Moderate 9-15	NV
193	Sandy clay loam	Acid <6.75	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	High>15	NV
194	Sandy clay loam	Acid <6.75	High >9	Not calcareous < 5	High>15	NV
195	Sandy clay loam	Neutral 6.75-7.2	Low<4	Not calcareous < 5	Low <9	NV
196	Sandy clay loam	Neutral 6.75-7.2	Low<4	Not calcareous < 5	Moderate 9-15	NV
197	Sandy clay loam	Neutral 6.75-7.2	Low<4	Not calcareous < 5	High>15	NV
198	Sandy clay loam	Neutral 6.75-7.2	Low<4	Low-moderately calcareous 5-25	Moderate 9-15	NV
199	Sandy clay loam	Neutral 6.75-7.2	Low<4	Highly calcareous >25	Moderate 9-15	NV
200	Sandy clay loam	Neutral 6.75-7.2	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	High>15	NV
201	Sandy clay loam	Basic > 7.2	Low<4	Not calcareous < 5	Low <9	NV

202	Sandy clay loam	Basic > 7.2	Low<4	Not calcareous < 5	Moderate 9-15	NV
203	Sandy clay loam	Basic > 7.2	Low<4	Not calcareous < 5	High>15	NV
204	Sandy clay loam	Basic > 7.2	Low<4	Low-moderately calcareous 5-25	Low <9	NV
205	Sandy clay loam	Basic > 7.2	Low<4	Low-moderately calcareous 5-25	Moderate 9-15	NV
206	Sandy clay loam	Basic > 7.2	Low<4	Low-moderately calcareous 5-25	High>15	NV
207	Sandy clay loam	Basic > 7.2	Low<4	Highly calcareous >25	Moderate 9-15	NV
208	Sandy clay loam	Basic > 7.2	Low<4	Highly calcareous >25	High>15	NV
209	Sandy clay loam	Basic > 7.2	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	High>15	NV
210	Sandy clay loam	Basic > 7.2	Moderate 4-9	Highly calcareous >25	High>15	NV
211	Sandy clay loam	Basic > 7.2	High >9	Not calcareous < 5	High>15	NV
212	Sandy loam	Acid <6.75	Low<4	Not calcareous < 5	Moderate 9-15	NV
213	Sandy loam	Acid <6.75	Low<4	Low-moderately calcareous 5-25	High>15	NV
214	Sandy loam	Acid <6.75	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	Low <9	NV



215	Sandy loam	Acid <6.75	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	Moderate 9-15	NV
216	Sandy loam	Acid <6.75	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	High>15	NV
217	Sandy loam	Acid <6.75	High >9	Not calcareous < 5	Moderate 9-15	NV
218	Sandy loam	Acid <6.75	High >9	Not calcareous < 5	High>15	NV
219	Sandy loam	Neutral 6.75-7.2	Low<4	Not calcareous < 5	Moderate 9-15	NV
220	Sandy loam	Neutral 6.75-7.2	Low<4	Low-moderately calcareous 5-25	Low <9	NV
221	Sandy loam	Basic > 7.2	Low<4	Not calcareous < 5	Moderate 9-15	NV
222	Sandy loam	Basic > 7.2	Low<4	Not calcareous < 5	High>15	NV
223	Sandy loam	Basic > 7.2	Low<4	Low-moderately calcareous 5-25	Low <9	NV
224	Sandy loam	Basic > 7.2	Low<4	Low-moderately calcareous 5-25	Moderate 9-15	NV
225	Sandy loam	Basic > 7.2	Low<4	Low-moderately calcareous 5-25	High>15	NV
226	Sandy loam	Basic > 7.2	Low<4	Highly calcareous >25	Low <9	NV
227	Sandy loam	Basic > 7.2	Low<4	Highly calcareous >25	Moderate 9-15	NV

228	Sandy loam	Basic > 7.2	Low<4	Highly calcareous >25	High>15	NV
229	Sandy loam	Basic > 7.2	Moderate 4-9	Low-moderately calcareous 5-25	Moderate 9-15	NV
230	Loamy sand	Acid <6.75	Low<4	Not calcareous < 5	Moderate 9-15	NV
231	Loamy sand	Acid <6.75	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	Moderate 9-15	NV
232	Loamy sand	Neutral 6.75-7.2	Low<4	Not calcareous < 5	Low <9	NV
233	Loamy sand	Neutral 6.75-7.2	Low<4	Not calcareous < 5	Moderate 9-15	NV
234	Loamy sand	Neutral 6.75-7.2	Low<4	Low-moderately calcareous 5-25	Low <9	NV
235	Loamy sand	Basic > 7.2	Low<4	Not calcareous < 5	Low <9	NV
236	Loamy sand	Basic > 7.2	Low<4	Not calcareous < 5	Moderate 9-15	NV
237	Loamy sand	Basic > 7.2	Low<4	Not calcareous < 5	High>15	NV
238	Loamy sand	Basic > 7.2	Low<4	Low-moderately calcareous 5-25	Low <9	NV
239	Loamy sand	Basic > 7.2	Low<4	Low-moderately calcareous 5-25	Moderate 9-15	NV
240	Loamy sand	Basic > 7.2	Low<4	Low-moderately calcareous	High>15	NV

				5-25		
241	Loamy sand	Basic > 7.2	Low<4	Highly calcareous >25	Low <9	NV
242	Loamy sand	Basic > 7.2	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	Moderate 9-15	NV
243	Sand	Acid <6.75	Low<4	Not calcareous < 5	Low <9	NV
244	Sand	Acid <6.75	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	Moderate 9-15	NV
245	Sand	Neutral 6.75-7.2	Low<4	Not calcareous < 5	Low <9	NV
246	Sand	Neutral 6.75-7.2	Low<4	Not calcareous < 5	Moderate 9-15	NV
247	Sand	Neutral 6.75-7.2	Low<4	Low-moderately calcareous 5-25	Low <9	NV
248	Sand	Basic > 7.2	Low<4	Not calcareous < 5	Low <9	NV
249	Sand	Basic > 7.2	Low<4	Low-moderately calcareous 5-25	Low <9	NV
250	Sand	Basic > 7.2	Low<4	Low-moderately calcareous 5-25	Moderate 9-15	NV
251	Sand	Basic > 7.2	Low<4	Low-moderately calcareous 5-25	High>15	NV
252	Humus-bearing 15 - 30	Acid <6.75	Inf 30	Not calcareous < 5	Moderate 9-15	NV
253	Humus-bearing	Acid <6.75	Inf 30	Not calcareous	High>15	NV

	15 - 30			< 5		
--	---------	--	--	-----	--	--

Tableau A.14 Soil taxonomy groups comprised in each archetype

Archetype	Soil taxonomy					
1	Haplic Kastanozems      Mollic Fluvisols					
3	Eutric cambisols	Eutric Regosols	Eutric Fluvisols	Stagnic Luvisols	Eutric Gleysols	Gleyic Lixisols
	Mollic Gleysol	Dystic Vertisols	Haplic Phaeozems	Gleyic Cambisols	Chromic Luvisols	Gleyic Luvisols
	Umbric Leptosols	Dystic Gleysols	Dystic Fluvisols	Luvic Phaeozems	Luvic Phaeozems	Umbric Gleysols
	Thionic Fluvisols	Eutric Planosols	Gleyic Solonetz	Haplic Luvisols	Rhodic Nitisols	Stagnic Phaeozems
		Ferrallic cambisols	Calcic Vertisols	Humic Nitisols	Chromic Cambisols	
	Eutric Vertisols		Humic Vertic Luvisols		Vertic Cambisols	Gleysols
	Haplic Nitisols	Eutric Leptosols	Cambisols	Humic Alisols	Vertic Cambisols	Orthic Luvisols
	Haplic Acrisols	Haplic Andosols	Haplic Lixisols	Rhodic Ferralsols	Dystic cambisols	
						Regosols
4	Cumulic Anthrosols      Salic Fluvisols					
8	Eutric cambisols      Haplic Phaeozems					
9	Lithic Leptosols      Mollic Leptosols      Mollic Solonetz      Eutric cambisols					
10	Calcic Chernozems					
12	Dystic Regosols	Dystic Planosols	Dystic cambisols	Plinthic Acrisols	Dystic Plinthosols	Dystic Gleysols
	Albic Plinthosols	Haplic Acrisols	Haplic Ferralsols	Gleyic Arenosols	Dystic Fluvisols	Gleyic Acrisols
	Dystic Leptosols	Eutric Gleysols				
14	Gleyic Solonetz      Mollic Gleysol      Mollic Solonetz      Calcic Solonetz      Haplic Kastanozems					
15	Mollic Gleysol	Gleyic Podzoluvisols	Haplic Phaeozems	Luvic Phaeozems	Gleyic Phaeozems	Eutric cambisols
	Gleyic Luvisols	Humic Nitisols	Humic Cambisols	Haplic Kastanozems	Humic Eutric Regosols	Eutric Leptosols
	Chromic Luvisols	Eutric Planosols	Eutric Gleysols	Eutric Fluvisols	Albic Luvisols	Humic Alisols
	Phaeozems					
16	Aric Anthrosols					
17	Gelic Gleysols	Humic Cambisols	Umbric Gleysols	Vitric Andosols	Mollic Andosols	Cambic Podzols
	Haplic Phaeozems	Umbric Fluvisols	Mollic Planosols	Chromic Luvisols	Luvic Phaeozems	Humic Alisols
	Ferrallic cambisols	Haplic Acrisols	Umbric Andosols	Eutric Planosols	Haplic Andosols	Eutric Leptosols
	Dystic cambisols	Dystic Gleysols	Eutric cambisols	Eutric Regosols	Haplic Alisols	Humic Gleysols

	Humic Nitosols	Leptic Podzols				
18	Gelic Andosols Umbric Gleysols	Haplic Podzols Ochric Andosols	Haplic Andosols Humic Andosols	Umbric Andosols Andosols	Humic Cambisols Mollic Andosols	Haplic Phaeozems
19	Luvic Phaeozems	Mollic Andosols	Eutric Leptosols			
20	Aric Anthrosols Luvic Gypsisols Calcic Yermosols	Salic Fluvisols Eutric Fluvisols Fluvisols	Eutric cambisols Eutric Regosols	Eutric Gleysols Haplic Luvisols	Gypsisols Haplic Solonetz	Petric Gypsisols Lithosols
21	Gleyic Solonchaks Sodic Solonchaks Orthic Solonchaks Gleyic Solonetz	Calcaric Fluvisols Calcic Solonchaks Yermosols	Fimic Anthrosols Anthrosols Takyric Yermosols	Calcic Gypsisols Calcisols Xerosols	Petric Gypsisols Cumulic Anthrosols Haplic Xerosols	Solonchaks Haplic Calcisols Calcic Luvisols
22	Calcaric Regosols	Calcic Chernozems				
23	Dystric cambisols Dystric Regosols Humic Cambisols Ferric Acrisols Haplic Lixisols Plinthic Ferralsols Dystric Plinthosols Ferralic Arenosols Ferric Luvisols Gleyic Podzols Eutric Fluvisols Haplic Nitisols Albic Arenosols	Dystric Leptosols Haplic Acrisols Vertic Luvisols Plinthic Acrisols Xanthic ferralsols Albic Luvisols Haplic Alisols Carbic Podzols Calcaric Regosols Luvic Arenosols Eutric Plinthosols Orthic ferralsols Solodic Planosols	Dystric Fluvisols Eutric Gleysols Gleyic Acrisols Plinthic Alisols Haplic Ferralsols Chromic Cambisols Ferric Lixisols Gleyic Solonetz Gypsic Regosols Haplic Arenosols Calcic Luvisols Vertic Cambisols Humic Planosols	Gelic cambisols Dystric Podzoluvisols Dystric Planosols Haplic Chernozems Gleyic Luvisols Eutric Regosols Umbric Planosols Eutric Leptosols Umbric Regosols Mollic Planosols Gleyic Arenosols Plinthic Luvisols Humic Ferralsols	Eutric Planosols Dystric Gleysols Eutric Podzoluvisols Luvic Kastanozems Eutric cambisols Albic Plinthosols Rhodic Ferralsols Haplic Solonetz Haplic Phaeozems Luvic Phaeozems Gelic Regosols Dystric Nitosols Thionic Fluvisols	Chromic Luvisols Gleyic Cambisols Mollic Gleysol Humic Acrisols Haplic Luvisols Rhodic Nitisols Ferralic cambisols Stagnic Luvisols Vitric Andosols Cambic Arenosols Stagnic Solonetz Eutric Nitosols
24	Chromic Luvisols Umbric Regosols Calcic Chernozems	Haplic Andosols Xanthic ferralsols Gelic Regosols	Haplic Phaeozems Eutric cambisols Dystric Regosols	Vitric Andosols Haplic Arenosols	Dystric Planosols Haplic Alisols	Eutric Leptosols Eutric Regosols

26	Eutric cambisols	Calcaric Gleysols	Salic Fluvisols	Eutric Regosols	Haplic Phaeozems	Haplic Lixisols
	Eutric Planosols	Vertic Luvisols	Eutric Leptosols	Chromic Cambisols	Dystic Regosols	Stagnic Solonetz
	Ferric Luvisols	Calcic Luvisols	Orthic Solonetz	Dystic Plinthosols		
27	Haplic Kastanozems	Luvic Kastanozems	Chromic Cambisols	Mollic Andosols	Calcic Luvisols	
29	Calcic Kastanozems	Haplic Gypsisols	Calcic Gypsisols	Albic Lixisols	Eutric Regosols	Eutric Fluvisols
	Haplic Arenosols	Eutric cambisols	Stagnic Solonetz	Haplic Lixisols	Haplic Solonetz	Lithic Leptosols
	Eutric Leptosols	Haplic Solonchaks	Chromic Cambisols	Eutric Planosols	Chromic Luvisols	Calcaric Cambisols
	Ferric Luvisols	Gleyic Solonetz	Calcic Solonetz	Luvic Yermosols		
36	Ferric Podzols	Gleyic Podzols	Eutric Regosols	Haplic Luvisols	Cambic Podzols	Albic Luvisols
	Gleyic Luvisols	Stagnic Luvisols	Umbric Gleysols	Ferric Luvisols	Albic Arenosols	Plinthic Lixisols
	Calcic Solonetz	Ferralic Arenosols	Haplic Ferralsols	Rhodic Ferralsols	Gleyic Alisols	Haplic Alisols
	Haplic Acrisols	Xanthic ferralsols	Chromic Luvisols	Ferralsols	Eutric cambisols	Eutric Gleysols
	Haplic Arenosols	Plinthic Acrisols	Humic Plinthosols	Luvic Arenosols	Umbric Regosols	Dystic Planosols
	Ferralic cambisols	Eutric Planosols	Haplic Lixisols	Carbic Podzols	Ferric Acrisols	Gleyic Cambisols
	Eutric Fluvisols	Cambic Arenosols	Vitric Andosols	Dystic Regosols	Eutric Leptosols	Albic Plinthosols
	Chromic Cambisols	Ferric Lixisols	Haplic Solonetz	Regosols	Phaeozems	Podzols
	Orthic Acrisols	Orthic Luvisols	Leptic Podzols	Gleyic Acrisols	Humic Gleysols	
				Gleyic Arenosols		
37	Eutric Regosols					
38	Umbric Leptosols					
39						
	Vitric Andosols	Haplic Podzols	Ferric Podzols			
40	Vitric Andosols					
41	Carbic Podzols					
43	Cumulic Anthrosols	Gleyic Arenosols	Carbic Podzols	Humic Podzols		
50	Fibric Histosols	Gelic Histosols	Terric Histosols	Thionic Histosols	Histosols	
52	Haplic Ferralsols	Xanthic ferralsols	Rhodic Ferralsols	Ferric Acrisols	Ferralic cambisols	Acric Ferralsols
53	Plinthic Alisols	Ferralic cambisols	Xanthic ferralsols	Rhodic Ferralsols	Rhodic Nitisols	Haplic Nitisols
	Haplic Ferralsols	Ferric Acrisols	Chromic Cambisols	Luvic Phaeozems	Haplic Acrisols	Thionic Fluvisols
	Humic Ferralsols	Plinthic Acrisols	Dystic Vertisols	Chromic Luvisols	Haplic Lixisols	Geric Ferralsols
	Humic Nitisols	Plinthic Lixisols				

54	Sodic Solonchaks	Eutric Vertisols	Gleyic Solonetz	Mollic Gleysol Vertic Cambisols	Haplic Alisols	Dystic Gleysols
	Vertic Luvisols	Eutric Gleysols	Eutric cambisols	Calcic Chernozems	Dystic cambisols	Luvic Phaeozems
	Humic Nitisols	Dystic Vertisols	Rhodic Nitisols	Gleyic Cambisols	Haplic Ferralsols	Eutric Fluvisols
	Haplic Acrisols	Haplic Lixisols	Gleyic Luvisols	Calcic Vertisols	Haplic Nitisols	
55	Haplic Ferralsols	Humic Nitisols	Rhodic Ferralsols	Humic Ferralsols		
56	Humic Nitisols	Eutric Gleysols	Dystic Plinthosols	Humic Cambisols	Haplic Ferralsols	Ferralic cambisols
	Umbric Leptosols	Dystic Leptosols	Humic Ferralsols	Chromic Luvisols	Humic Alisols	Vertic Luvisols
	Mollic Gleysol	Phaeozems	Dystic Gleysols	Rhodic Nitisols	Eutric Vertisols	
	Dystic Gleysols	Humic Nitisols	Umbric Andosols	Thionic Fluvisols	Dystic Vertisols	Humic Ferralsols
57	Haplic Ferralsols					
58	Rhodic Ferralsols					
59	Haplic Chernozems	Calcaric Gleysols	Vertic Cambisols	Eutric Vertisols	Eutric Gleysols	Calcaric Cambisols
	Calcic Vertisols	Luvic Phaeozems	Haplic Solonchaks	Haplic Nitisols		
60	Eutric Vertisols					
61	Calcaric Cambisols					
62	Calcic Luvisols	Gleyic Cambisols	Calcic Vertisols	Eutric Vertisols	Eutric Gleysols	Eutric cambisols
	Mollic Gleysol	Calcaric Cambisols	Calcic Kastanozems	Sodic Solonchaks	Eutric Leptosols	Haplic Solonetz
	Haplic Phaeozems	Salic Fluvisols	Vertic Cambisols			
	Calcic Vertisols	Calcaric Cambisols	Gleyic Solonchaks			
63	Calcic Vertisols	Calcaric Cambisols	Gleyic Solonchaks			
64	Calcic Solonchaks	Haplic Calcisols				
65	Eutric Gleysols	Chromic Cambisols	Calcaric Phaeozems	Salic Fluvisols		
66	Haplic Ferralsols	Eutric Regosols	Dystic cambisols	Dystic Gleysols	Plinthic Acrisols	Haplic Acrisols
67	Haplic Acrisols	Dystic cambisols	Ferralic cambisols	Haplic Lixisols	Rhodic Nitisols	Dystic Plinthosols
	Gleyic Acrisols					
68	Mollic Planosols	Thionic Gleysols	Chromic Cambisols	Eutric Gleysols	Ferric Luvisols	Ferric Alisols
	Dystic Fluvisols	Luvic Phaeozems	Eutric Vertisols	Haplic Phaeozems	Eutric Fluvisols	Gleyic Phaeozems
	Gleyic Lixisols	Dystic cambisols	Gelic Gleysols	Eutric cambisols		
	Plinthic Acrisols	Humic Cambisols				
69						

70	Gleyic Phaeozems	Eutric Vertisols	Humic Nitisols	Albic Plinthosols	Eutric cambisols	Umbric Gleysols
	Dystric cambisols	Gleyic Cambisols	Dystric cambisols	Haplic Alisols	Eutric Gleysols	
71	Eutric Regosols					
72	Luvic Phaeozems	Eutric cambisols	Eutric Vertisols	Eutric Gleysols		
73	Eutric Vertisols					
74	Haplic Chernozems					
75	Gypsic Yermosols					
76	Mollic Solonetz	Gleyic Solonetz	Eutric Vertisols	Haplic Solonchaks	Chromic Cambisols	
77	Dystric Fluvisols					
78	Calcic Chernozems	Calcic Luvisols				
79	Calcic Chernozems					
80	Calcic Chernozems					
81	Xanthic ferralsols	Rhodic Ferralsols	Haplic Ferralsols	Geric Ferralsols	Eutric Plinthosols	Humic Ferralsols
	Haplic Acrisols	Haplic Nitisols	Dystric Leptosols	Ferric Acrisols	Ferralic cambisols	Plinthic Acrisols
	Dystric cambisols	Ferralsols	Haplic Lixisols	Ferric Lixisols	Plinthic Ferralsols	
82	Ferric Lixisols	Plinthic Acrisols	Haplic Ferralsols	Ferric Acrisols	Ferralic cambisols	Haplic Acrisols
	Ferric Alisols	Haplic Alisols	Haplic Lixisols	Xanthic ferralsols	Dystric cambisols	Rhodic Nitisols
	Eutric Gleysols	Ferralsols	Dystric Leptosols	Gleyic Cambisols	Chromic Cambisols	Ferric Luvisols
	Humic Nitisols	Phaeozems	Calcaric Gleysols	Lithic Leptosols	Haplic Nitisols	Stagnic Alisols
	Nitisols	Dystric Regosols	Haplic Solonetz	Orthic ferralsols	Eutric Nitosols	Dystric Nitosols
	Orthic Acrisols	Gleyic Acrisols	Geric Ferralsols	Humic Acrisols	Thionic Fluvisols	
83	Vertic Cambisols					
84	Dystric cambisols					
85	Ferric Acrisols	Xanthic ferralsols	Haplic Acrisols	Humic Ferralsols	Haplic Nitisols	Eutric Regosols
	Ferralic cambisols	Rhodic Nitisols				
86	Umbric Gleysols	Humic Cambisols	Stagnic Phaeozems	Mollic Fluvisols	Humic Nitisols	Humic Acrisols
	Haplic Ferralsols	Humic Ferralsols	Gleyic Phaeozems	Haplic Phaeozems	Eutric Vertisols	Eutric Fluvisols
		Dystric cambisols	Ferralic cambisols		Dystric Plinthosols	Chromic Luvisols
	Rhodic Nitisols			Dystric Gleysols		



	Xanthic ferralsols	Mollic Andosols Gleyic Cambisols	Haplic Nitisols Humic Nitosols	Luvic Phaeozems Humic Gleysols	Haplic Acrisols Thionic Fluvisols	Mollic Gleysol Ochric Andosols
87	Calcic Vertisols					
88	Fibric Histosols Dystric Histosols	Folic Histosols Eutric Histosols	Dystric Gleysols Histosols	Haplic Ferralsols Humic Andosols	Humic Cambisols Haplic Acrisols	Thionic Gleysols
89	Eutric Vertisols					
90	Dystric Fluvisols	Rhodic Nitisols	Takyric Yermosols			
91	Chromic Cambisols Calcic Vertisols Salic Fluvisols	Eutric Vertisols Haplic Phaeozems Haplic Luvisols	Gleyic Luvisols Luvic Phaeozems Pellic Vertisols	Vertic Luvisols Eutric cambisols Humic Nitisols	Vertic Cambisols Haplic Lixisols	Chromic Luvisols Mollic Solonetz
92	Vertic Cambisols	Calcic Vertisols	Eutric Vertisols			
93	Vertic Cambisols	Eutric Vertisols				
94	Eutric cambisols					
95	Luvic Chernozems	Vertic Luvisols	Luvic Phaeozems	Chromic Cambisols	Eutric Vertisols	
96	Eutric Gleysols	Haplic Lixisols	Ferric Luvisols	Haplic Calcisols	Gleyic Luvisols	Haplic Yermosols
97	Haplic Kastanozems Calcaric Cambisols Mollic Solonetz Eutric Leptosols Eutric Gleysols Takyric Solonchaks	Calcaric Gleysols Gypsic Solonchaks Eutric cambisols Haplic Luvisols Gypsic Vertisols Lithosols	Vertic Cambisols Haplic Solonetz Salic Fluvisols Chromic Cambisols Vertisols Haplic Xerosols	Haplic Solonchaks Haplic greyzems Chromic Luvisols Gleyic Solonetz Sodic Solonchaks Orthic Greyzems	Lithic Leptosols Calcic Vertisols Eutric Vertisols Mollic Gleysol Chromic vertisols Gypsic Xerosols	Calcaric Regosols Calcic Gypsisols Haplic Phaeozems Luvic Phaeozems Calcic Xerosols
98	Calcic Kastanozems Gleyic Solonetz Salic Fluvisols Kastanozems	Calcic Vertisols Luvic Calcisols Vertic Cambisols Calcaric Regosols	Calcaric Fluvisols Mollic Fluvisols Orthic Solonetz Rendzinas	Rendzic Leptosols Calcic Chernozems Solonchaks Calcaric Gleysols	Gleyic Solonchaks Calcaric Cambisols Orthic Solonchaks	Calcic Luvisols Haplic greyzems Calcic Cambisols
99	Humic Nitisols					
100	Gleyic Solonetz Eutric Vertisols	Haplic Nitisols Haplic	Calcic Vertisols	Chromic Luvisols	Mollic Fluvisols	Vertic Luvisols

	Phaeozems					
101	Calcaric Phaeozems	Rendzic Leptosols				
102	Gleyic Lixisols Albic Plinthosols	Dystric cambisols Ferrallic cambisols	Haplic Acrisols	Plinthic Acrisols	Dystric Plinthosols	Dystric Gleysols
103	Thionic Gleysols	Haplic Lixisols	Gleyic Luvisols	Chromic Luvisols	Ferric Alisols	Plinthic Acrisols
	Dystric Gleysols Haplic Acrisols	Eutric Gleysols	Dystric Leptosols	Dystric cambisols	Mollic Planosols	Eutric cambisols
104	Dystric Planosols	Mollic Solonetz	Luvic Phaeozems	Mollic Planosols	Eutric Gleysols	Eutric cambisols
	Eutric Leptosols	Chromic Cambisols	Mollic Gleysol	Gleyic Cambisols	Dystric cambisols	Dystric Gleysols
105	Luvic Phaeozems					
106	Haplic Acrisols	Haplic Ferralsols	Albic Plinthosols	Humic Ferralsols	Humic Cambisols	
107	Eutric Vertisols Umbric Andosols	Mollic Gleysol Luvic Phaeozems	Haplic Lixisols Haplic Alisols	Chromic Luvisols Gleyic Phaeozems	Humic Ferralsols	Eutric Gleysols
108	Eutric Gleysols					
109	Haplic Alisols	Umbric Andosols	Umbric Gleysols	Thionic Gleysols		
110	Haplic Solonetz Calcic Chernozems	Calcic Solonetz	Mollic Solonetz	Gleyic Solonetz	Calcaric Gleysols	Eutric Fluvisols
111	Luvic Kastanozems					
112	Eutric cambisols	Haplic Chernozems				
113	Haplic Kastanozems					
114	Eutric cambisols	Haplic Solonetz	Dystric Gleysols			
115	Haplic Solonetz Haplic Kastanozems	Luvic Phaeozems Humic Cambisols	Eutric Fluvisols	Eutric cambisols	Calcaric Fluvisols	Haplic Phaeozems
116	Chromic Cambisols					
117	Gleyic Solonetz	Luvic Phaeozems	Calcic Chernozems			
118	Haplic Nitisols	Ferrallic cambisols	Dystric cambisols	Dystric Planosols	Dystric Gleysols	Xanthic ferralsols
	Ferric Acrisols	Haplic Acrisols	Dystric Regosols	Plinthic Acrisols	Haplic Luvisols	Humic Acrisols
	Rhodic Nitisols	Eutric Regosols	Gelic Gleysols	Haplic Ferralsols		
119	Ferric Alisols	Eutric Gleysols	Dystric Gleysols	Eutric Leptosols	Ferrallic	Chromic

	Humic Cambisols	Eutric cambisols	Eutric Planosols	Dystic Fluvisols	cambisols	Cambisols
	Ferric Acrisols	Xanthic ferralsols	Dystic Plinthosols	Plinthic Acrisols	Haplic Acrisols	Rhodic Nitisols
	Chromic Luvisols	Luvic Phaeozems	Eutric Regosols	Dystic cambisols	Haplic	Humic Acrisols
	Gleyic Alisols	Eutric Fluvisols	Gleysols	Ferric Lixisols	Haplic Alisols	Haplic Lixisols
	Vertic Luvisols	Cambisols	Gleyic Cambisols	Haplic Solonchaks	Haplic Luvisols	Ferric Luvisols
120	Eutric Vertisols	Stagnic Phaeozems	Dystic Vertisols	Haplic Solonchaks	Mollic Solonetz	Mollic Planosols
	Haplic Phaeozems	Luvic Phaeozems	Eutric Leptosols	Gleyic Solonetz	Eutric cambisols	Dystic Leptosols
	Chromic Luvisols	Humic Cambisols	Humic Acrisols	Ferric Luvisols	Mollic Gleysol	Eutric Regosols
	Eutric Gleysols	Thionic Gleysols	Vertic Luvisols	Dystic cambisols	Mollic Fluvisols	Humic Alisols
	Gleyic Phaeozems	Lithic Leptosols	Eutric Fluvisols	Chromic Cambisols	Eutric Planosols	Dystic Planosols
	Umbric Planosols	Rhodic Ferralsols	Chromic Luvisols	Haplic Lixisols	Gleyic Cambisols	Haplic Solonetz
121	Mollic Fluvisols	Vertic Luvisols				
122	Ferric Acrisols	Dystic Fluvisols	Humic Acrisols	Eutric Leptosols	Haplic Alisols	
123	Thionic Fluvisols	Luvic Phaeozems	Humic Cambisols	Umbric Gleysols	Haplic Acrisols	Albic Plinthosols
	Ferric Alisols	Haplic Phaeozems	Eutric Vertisols	Eutric cambisols	Dystic cambisols	Humic Alisols
	Thionic Gleysols	Mollic Andosols	Umbric Leptosols	Vertic Cambisols	Gleyic Phaeozems	Mollic Leptosols
	Mollic Planosols	Humic Acrisols				
124	Terric Histosols	Luvic Phaeozems	Mollic Solonetz	Humic Cambisols	Umbric Andosols	Umbric Gleysols
	Thionic Histosols	Mollic Andosols				
125	Luvic Gypsisols	Haplic Luvisols	Eutric Regosols	Eutric Planosols	Albic Plinthosols	
126	Vertic Luvisols	Haplic Solonetz	Luvic Phaeozems	Haplic Chernozems	Chernozems	Luvic Chernozems
	Lithic Leptosols	Mollic Fluvisols	Chromic Cambisols	Luvic Kastanozems	Gleyic Chernozems	Calcaric Cambisols
	Stagnic Chernozems	Eutric Fluvisols	Pellic Vertisols			
127	Calcaric Cambisols					
128	Haplic Kastanozems	Stagnic Solonetz	Sodic Solonchaks			
129	Mollic Solonchaks	Haplic Luvisols	Luvic Chernozems	Sodic Solonchaks	Haplic Lixisols	Luvic Kastanozems
	Calcic Kastanozems	Calcaric Cambisols	Lithic Leptosols	Chromic Luvisols	Eutric Fluvisols	Luvic Yermosols

130	Gypsic Solonetz Gleyic Solonetz Eutric cambisols Calcaric Phaeozems Ferric Luvisols	Lithic Leptosols Luvic Kastanozems Luvic Phaeozems Calcic Chernozems Haplic Solonchaks	Salic Fluvisols Haplic Kastanozems Kastanozems Eutric Vertisols Sodic Solonchaks	Eutric Fluvisols Haplic Solonetz Calcic Kastanozems Calcaric Kastanozems Regosols	Eutric Gleysols Haplic Calcisols Calcaric Cambisols Chromic Luvisols	Mollic Solonetz Haplic Chernozems Haplic Gypsisols Eutric Planosols
131	Calcic Solonchaks	Calcaric Regosols				
132	Calcic Kastanozems Solonchaks	Gleyic Solonchaks Calcic Luvisols	Haplic Calcisols	Calcic Solonchaks	Calcaric Cambisols	Rendzic Leptosols
133	Luvic Calcisols	Calcic Vertisols				
134	Luvic Calcisols	Haplic Calcisols	Gleyic Solonchaks	Calcic Vertisols		
135	Rendzic Leptosols					
136	Eutric Planosols					
137	Gelic Regosols Dystric Gleysols Plinthic Alisols	Eutric Podzoluvisols Plinthic Acrisols Eutric Gleysols	Calcic Kastanozems Eutric cambisols Haplic Acrisols	Dystric cambisols Dystric Regosols	Eutric Regosols Albic Plinthosols	Haplic Acrisols Haplic Luvisols
138	Haplic greyzems Gleyic Phaeozems Eutric Leptosols	Stagnic Podzoluvisols Luvic Phaeozems Ferric Luvisols	Dystric Podzoluvisols Haplic Phaeozems Eutric Planosols	Mollic Planosols Luvic Kastanozems Orthic Greyzems	Eutric Fluvisols Eutric Regosols Gleyic Podzoluvisols	Dystric cambisols Eutric cambisols
139	Dystric Plinthosols	Haplic Andosols	Dystric Leptosols			
140	Ferric Podzols Mollic Andosols	Gleyic Podzols Eutric Gleysols	Umbric Andosols Eutric Regosols	Luvic Phaeozems	Haplic Phaeozems	Dystric Gleysols
141	Mollic Andosols					
142	Gelic Histosols	Albic Plinthosols	Umbric Andosols	Placic Podzols		
143	Haplic greyzems	Dystric Planosols				
144	Haplic Chernozems	Dystric cambisols				
145	Dystric Regosols					
146	Haplic Andosols	Eutric Fluvisols				
147	Eutric Fluvisols					
148	Dystric Fluvisols	Eutric Fluvisols				

149	Eutric Fluvisols	Haplic Solonchaks	Sodic Solonchaks			
150	Cumulic Anthrosols					
151	Calcaric Fluvisols					
152	Haplic Ferralsols	Xanthic ferralsols	Rhodic Ferralsols	Ferralic cambisols	Haplic Acrisols	Chromic Luvisols
	Ferric Acrisols	Plinthic Acrisols	Dystric cambisols	Rhodic Nitisols	Plinthic Lixisols	Plinthic Ferralsols
	Haplic Lixisols	Humic Ferralsols				
153	Haplic Ferralsols	Xanthic ferralsols	Humic Acrisols	Rhodic Ferralsols	Ferralic cambisols	Haplic Acrisols
	Haplic Lixisols	Chromic Luvisols	Rhodic Nitisols	Ferric Acrisols	Gleyic Cambisols	Haplic Luvisols
	Eutric cambisols	Humic Ferralsols	Ferric Lixisols			
154	Haplic Luvisols	Dystric Gleysols	Vertic Luvisols	Eutric Gleysols	Eutric cambisols	Gleyic Luvisols
	Haplic Solonetz					
155	Haplic Ferralsols	Ferric Acrisols	Haplic Acrisols			
156	Ferralic cambisols	Luvic Phaeozems	Humic Acrisols			
157	Humic Ferralsols	Humic Cambisols				
158	Haplic Lixisols					
159	Chromic Cambisols	Chromic Luvisols	Calcic Luvisols			
160	Chromic Cambisols	Gleyic Luvisols				
161	Calcic Luvisols					
162	Gypsic Vertisols					
163	Haplic Calcisols	Cambic Arenosols	Calcic Solonetz	Haplic Luvisols		
164	Calcic Solonchaks	Calcaric Fluvisols	Eutric Gleysols			
165	Eutric cambisols					
166	Dystric Planosols	Dystric Fluvisols	Dystric Leptosols	Plinthic Acrisols	Mollic Gleysols	Eutric cambisols
	Haplic Acrisols	Dystric Gleysols	Eutric Planosols	Haplic Lixisols	Gleyic Cambisols	Chromic Cambisols
	Dystric Plinthosols	Umbric Planosols	Eutric Fluvisols	Gleyic Acrisols	Eutric cambisols	Haplic Alisols
	Eutric Leptosols	Albic Plinthosols	Albic Arenosols	Plinthic Gleysols	Humic Ferralsols	Dystric Regosols
167	Dystric Gleysols	Gleyic Cambisols	Eutric Planosols	Dystric cambisols	Albic Luvisols	Haplic Luvisols
	Chromic Luvisols	Chromic Cambisols	Eutric Regosols	Dystric Regosols	Plinthic Alisols	Eutric Gleysols

	Stagnic Luvisols	Haplic Alisols	Mollic Fluvisols	Leptosols	Eutric Leptosols	Gelic cambisols
	Stagnic Alisols	Eutric cambisols	Haplic Phaeozems	Luvic Phaeozems	Luvic Kastanozems	Eutric Plinthosols
	Haplic Acrisols	Ferric Alisols	Eutric Fluvisols	Umbric Leptosols	Ferric Luvisols	Gelic Leptosols
	Cambisols	Rhodic Ferralsols	Humic Cambisols	Xanthic ferralsols	Ferric Acrisols	Gleyic Phaeozems
	Albic Plinthosols	Haplic Lixisols	Gleyic Luvisols	Gleysols	Eutric Nitosols	Orthic Luvisols
	Dystic Nitosols	Solodic Planosols	Regosols	Nitosols	Luvisols	Humic Planosols
	Planosols	Humic Acrisols	Plinthic Luvisols	Cambisols	Rankers	
168	Umbric Leptosols	Eutric cambisols	Vitric Andosols	Ferralic cambisols	Mollic Leptosols	Gelic Podzols
	Humic Cambisols	Dystic cambisols	Haplic Luvisols	Eutric Leptosols		
169	Umbric Fluvisols					
170	Umbric Leptosols	Haplic Phaeozems	Umbric Andosols			
171	Ferric Luvisols					
172	Calcaric Gleysols	Eutric Fluvisols	Haplic Kastanozems	Eutric cambisols	Fluvisols	Eutric Planosols
	Haplic Luvisols	Calcaric Cambisols	Eutric Gleysols			
173	Eutric Fluvisols	Vertic Cambisols	Gleyic Chernozems	Calcaric Phaeozems	Dystic Fluvisols	Haplic Phaeozems
	Mollic Leptosols	Luvic Kastanozems	Rendzinas	Luvic Chernozems	Mollic Solonetz	
174	Dystic Regosols					
175	Luvic Chernozems	Gleyic Solonetz	Rendzic Leptosols			
176	Haplic Gypsisols	Eutric Fluvisols	Chromic Cambisols	Luvic Yermosols	Haplic Yermosols	
177	Calcaric Phaeozems	Lithic Leptosols	Haplic Gypsisols	Calcic Chernozems	Mollic Solonetz	Luvic Kastanozems
	Luvic Phaeozems	Haplic Luvisols	Eutric Regosols	Haplic Solonchaks	Haplic Phaeozems	Eutric Fluvisols
	Solonetz	Calcaric Cambisols	Luvic Chernozems	Calcic Solonetz	Calcic Luvisols	Gypsic Xerosols
	Chernozems					
178	Gypsic Solonchaks					
179	Luvic Calcisols	Haplic Solonchaks	Haplic Kastanozems	Calcic Kastanozems	Haplic Solonetz	Gleyic Solonetz
	Rendzic Leptosols	Calcaric Cambisols	Calcaric Regosols	Haplic Calcisols	Calcic Gypsisols	Calcaric Fluvisols
	Gleyic Solonchaks	Calcic Xerosols	Orthic Solonetz	Solonetz	Calcic Cambisols	Kastanozems
	Calcic Chernozems					
180	Gypsic					

	Solonchaks					
181	Calcic Yermosols	Gypsic Yermosols				
182	Haplic Calcisols	Gleyic Solonchaks	Calcaric Cambisols	Rendzic Leptosols		
183	Eutric Leptosols					
184	Mollic Leptosols	Umbric Gleysols	Luvic Kastanozems			
185	Calcaric Fluvisols	Calcaric Regosols				
186	Haplic Acrisols	Haplic Lixisols	Cambic Arenosols	Haplic Ferralsols	Ferralic cambisols	Xanthic ferralsols
		Dystric Leptosols		Dystric Fluvisols	Plinthic Ferralsols	Haplic Solonetz
	Ferric Acrisols	Rhodic Ferralsols	Gleyic Alisols	Albic Plinthosols	Plinthic Acrisols	Ferric Luvisols
	Eutric cambisols		Dystric Regosols			
	Dystric cambisols	Ferric Lixisols	Dystric Plinthosols	Eutric Leptosols	Geric Ferralsols	Haplic Alisols
	Lithic Leptosols	Haplic Phaeozems				Stagnic Lixisols
	Dystric Planosols	Umbric Gleysols	Mollic Fluvisols	Haplic Luvisols	Eutric Regosols	Eutric Planosols
		Haplic	Plinthic Lixisols	Plinthosols	Humic Plinthosols	Chromic Cambisols
	Humic Acrisols	Arenosols	Calcaric Cambisols	Gleyic Lixisols	Chromic Luvisols	
187	Eutric Gleysols	Mollic Gleysol	Orthic ferralsols	Acric Ferralsols	Orthic Acrisols	Ferralsols
			Humic Ferralsols	Humic Cambisols	Ferralic Arenosols	
	Acrisols	Haplic Nitisols				
	Mollic Fluvisols	Ferric Luvisols	Humic Acrisols	Haplic Luvisols	Haplic Lixisols	Eutric cambisols
	Luvic Phaeozems	Chromic Luvisols				Chromic Cambisols
	Gleyic Solonetz	Luvisols	Haplic Acrisols	Gleyic Luvisols	Haplic Alisols	
	Umbric Leptosols	Calcic Solonetz	Rhodic Ferralsols	Haplic Solonchaks	Eutric Leptosols	Ferric Acrisols
	Eutric Planosols	Ferralic cambisols	Plinthic Acrisols	Eutric Plinthosols	Dystric Gleysols	Xanthic ferralsols
	Dystric cambisols	Haplic Ferralsols	Haplic Phaeozems	Dystric Leptosols	Gleysols	Calcic Luvisols
188		Humic Ferralsols	Dystric Regosols	Petric Calcisols	Eutric Fluvisols	Plinthic Lixisols
	Haplic Nitisols	Humic Ferralsols			Phaeozems	Plinthic Alisols
	Eutric Gleysols	Eutric Regosols	Luvisols	Stagnic Solonetz	Ferric Lixisols	
189		Dystric Fluvisols				
	Albic Luvisols	Calcic Luvisols	Humic Cambisols	Chromic Cambisols	Eutric Gleysols	Haplic Phaeozems
	Luvic Phaeozems	Rhodic Nitisols	Chromic Luvisols			Eutric Planosols
	Dystric Regosols	Ferric Acrisols	Eutric cambisols	Haplic Calcisols	Haplic Luvisols	
189			Dystric cambisols	Mollic Gleysol	Gleyic Luvisols	Ferric Luvisols
	Eutric Regosols	Haplic Solonetz				
189						
	Haplic Calcisols	Haplic Phaeozems	Chromic Cambisols			

190	Luvic Phaeozems					
191	Humic Ferralsols					
192	Albic Plinthosols	Haplic Ferralsols	Haplic Acrisols	Humic Ferralsols	Umbric Leptosols	Dystric Regosols
193	Humic Acrisols					
193	Eutric Leptosols	Eutric cambisols	Humic Cambisols	Humic Alisols	Dystric Regosols	Ferric Luvisols
	Haplic Alisols	Haplic Phaeozems				
194	Humic Cambisols					
195	Haplic Luvisols	Haplic Lixisols	Ferric Luvisols	Cambic Arenosols		
196	Chromic Cambisols	Eutric cambisols	Haplic Solonetz	Haplic Luvisols	Eutric Leptosols	Calcic Luvisols
	Chromic Luvisols	Eutric Regosols				
197	Haplic Luvisols	Vertic Luvisols	Haplic Solonetz	Eutric cambisols	Luvic Phaeozems	Calcic Vertisols
	Eutric Vertisols	Eutric Planosols	Ferric Luvisols	Chromic Vertisols		
198	Haplic Calcisols					
199	Eutric Leptosols					
200	Calcaric Cambisols	Mollic Andosols	Haplic Chernozems	Eutric Fluvisols		
201	Calcic Luvisols	Chromic Luvisols	Ferric Luvisols	Haplic Arenosols		
202	Eutric Fluvisols	Eutric Leptosols	Lithic Leptosols	Chromic Luvisols	Calcic Luvisols	Calcic Solonetz
	Calcaric Cambisols	Gleyic Solonetz	Haplic Solonetz	Calcic Vertisols	Eutric Regosols	Chromic Cambisols
	Eutric cambisols	Haplic Luvisols	Ferric Luvisols	Luvic Xerosols		
203	Petric Calcisols	Lithic Leptosols	Eutric Leptosols	Luvic Kastanozems	Calcic Solonetz	Humic Cambisols
	Calcic Luvisols	Luvic Chernozems	Luvic Phaeozems	Haplic Solonetz	Haplic Luvisols	Haplic Solonchaks
	Calcaric Cambisols	Mollic Andosols	Eutric cambisols	Gleyic Luvisols	Calcic Vertisols	
204	Gleyic Solonchaks	Petric Calcisols				
205	Calcic Luvisols	Petric Calcisols	Luvic Calcisols	Calcaric Fluvisols	Haplic Solonetz	
206	Calcic Vertisols	Calcic Solonetz	Sodic Solonchaks	Petric Calcisols	Rendzic Leptosols	Haplic Calcisols
	Calcaric Regosols	Gleyic Solonchaks				
207	Haplic Calcisols					
		Petric Calcisols				
208	Luvic Calcisols					



209	Calcaric Haplic Luvisols Haplic Solonetz Mollic Andosols Cambisols					
210	Calcaric Phaeozems					
211	Lithic Leptosols					
212	Mollic Leptosols Dystric Regosols Haplic Acrisols Chromic Cambisols Lithic Leptosols Eutric Leptosols Gleyic Lixisols	Luvic Phaeozems Luvic Kastanozems Rhodic Ferralsols Humic Cambisols Thionic Fluvisols Humic Acrisols Dystric Fluvisols	Haplic Phaeozems Haplic Solonetz Eutric Fluvisols Dystric Leptosols Ferric Luvisols Haplic Lixisols	Gleyic Phaeozems Vitric Andosols Umbric Leptosols Haplic Luvisols Chromic Luvisols Dystric cambisols	Gelic Leptosols Eutric Regosols Ferric Lixisols Albic Luvisols Eutric Gleysols Haplic Alisols	Calcic Luvisols Eutric Planosols Eutric cambisols Ferralic cambisols Eutric Leptosols Dystric Gleysols
213	Petric Calcisols					
214	Haplic Lixisols					
215	Haplic Andosols Ferric Acrisols	Umbric Fluvisols Mollic Andosols	Eutric Leptosols Vitric Andosols	Umbric Leptosols Cambic Podzols	Dystric Leptosols Ochric Andosols	Haplic Lixisols Humic Cambisols
216	Vitric Andosols Dystric cambisols	Haplic Phaeozems Humic Cambisols	Umbric Andosols Haplic Alisols	Haplic Luvisols Umbric Gleysols	Umbric Leptosols Dystric Regosols	Dystric Leptosols Orthic Podzols
217	Umbric Andosols Eutric cambisols					
218	Umbric Andosols	Haplic Podzols	Vitric Andosols	Humic Cambisols	Umbric Leptosols	Dystric Leptosols
219	Rendzic Leptosols Chromic Luvisols Gleyic Solonetz	Luvic Chernozems Eutric Planosols Lithic Leptosols	Eutric Fluvisols Calcaric Regosols Luvic Arenosols	Eutric Regosols Haplic Lixisols Mollic Leptosols	Haplic Calcisols Haplic Luvisols	Eutric cambisols Haplic Solonetz
220	Chromic Cambisols Eutric Leptosols Ferric Lixisols					
221	Calcaric Cambisols Mollic Leptosols Calcic Luvisols Eutric Leptosols Lithosols	Lithic Leptosols Haplic Solonetz Haplic Alisols Haplic Luvisols	Calcaric Phaeozems Haplic Calcisols Eutric Fluvisols Calcic Solonetz	Eutric cambisols Mollic Solonetz Stagnic Solonetz Gleyic Solonetz	Luvic Phaeozems Haplic Arenosols Chromic Cambisols Sodic Solonchaks	Eutric Regosols Haplic Chernozems Calcaric Regosols Calcic Cambisols
222	Calcic Solonetz Sodic	Mollic Gleysol	Haplic Phaeozems	Haplic Calcisols	Eutric Regosols	Mollic Leptosols

	Solonchaks					
223	Gleyic Solonchaks Xerosols	Haplic Calcisols	Petric Calcisols	Calcic Solonchaks	Calcic Gypsisols	Calcaric Arenosols
224	Luvic Calcisols	Petric Calcisols	Calcaric Regosols	Haplic Xerosols	Calcic Xerosols	Mollic Solonchaks
225	Haplic Calcisols	Calcaric Regosols	Mollic Leptosols			
226	Gleyic Solonchaks					
227	Petric Calcisols					
228	Petric Calcisols	Luvic Calcisols	Gleyic Solonchaks			
229	Petric Calcisols					
230	Haplic Podzols Luvic Arenosols	Dystic Regosols Eutric Regosols	Mollic Leptosols Albic Arenosols	Eutric cambisols Orthic Podzols	Mollic Andosols	Ferric Lixisols
231	Umbric Gleysols	Haplic Podzols	Placic Podzols	Vitric Andosols	Mollic Andosols	
232	Eutric Fluvisols Haplic Luvisols	Haplic Lixisols Chromic Cambisols	Eutric Regosols Eutric cambisols	Ferralic Arenosols Eutric Leptosols	Eutric Planosols Fluvisols	Gleyic Arenosols Luvic Xerosols
233	Haplic Arenosols	Gelic Regosols	Eutric Leptosols			
234	Calcic Luvisols	Luvic Calcisols				
235	Gypsic Solonchaks Rhodic Ferralsols Ferric Luvisols	Haplic Solonchaks Eutric Fluvisols Chromic Cambisols	Haplic Calcisols Calcic Solonetz Yermosols	Eutric cambisols Petric Gypsisols Gypsic Yermosols	Eutric Regosols Cambic Arenosols Gleyic Solonchaks	Haplic Arenosols Ferralic Arenosols
236	Calcic Chernozems Gleyic Cambisols	Haplic Calcisols Mollic Solonetz	Eutric Regosols Humic Cambisols	Dystic Regosols Cambic Arenosols	Haplic Arenosols Calcaric Cambisols	Dystic Leptosols Eutric Leptosols
237	Petric Calcisols	Haplic Arenosols				
238	Luvic Calcisols Cambic Arenosols Petric Calcisols	Calcic Solonchaks Luvic Arenosols	Haplic Yermosols Calcaric Fluvisols	Calcic Yermosols Haplic Calcisols	Orthic Solonchaks Calcaric Regosols	Calcic Luvisols Petric Gypsisols
239	Luvic Calcisols	Petric Calcisols	Calcaric Arenosols	Calcaric Fluvisols		
240	Petric Calcisols					
241	Petric Calcisols	Calcaric Arenosols				
242	Albic Arenosols					
243	Albic Arenosols	Cambic Arenosols	Haplic Arenosols	Luvic Arenosols	Gleyic Arenosols	Carbic Podzols

	Calcaric Arenosols Plinthic Acrisols Albic Plinthosols Salic Fluvisols Albic Luvisols	Ferralic Arenosols Gleyic Podzols Ferric Luvisols Eutric Planosols Ferric Acrisols	Haplic Alisols Umbric Regosols Haplic Luvisols Arenosols Ferric Lixisols	Eutric Regosols Ferralic cambisols Calcic Luvisols Dystic Planosols Gleyic Lixisols	Eutric Fluvisols Haplic Lixisols Dystic Leptosols Chromic Cambisols	Haplic Podzols Haplic Acrisols Dystic Regosols Eutric Gleysols
244	Dystic Regosols					
245	Haplic Arenosols Carbic Podzols	Luvic Arenosols	Ferralic Arenosols	Eutric cambisols	Ferric Luvisols	Eutric Planosols
246	Eutric Regosols					
247	Luvic Calcisols	Petric Calcisols				
248	Luvic Gypsisols Eutric Gleysols Sodic Solonchaks	Haplic Calcisols Cambic Arenosols Albic Arenosols	Dystic Regosols Calcic Solonetz Chromic Cambisols	Calcaric Regosols Luvic Arenosols Eutric Planosols	Calcaric Arenosols Eutric Regosols Gleyic Solonetz	Haplic Arenosols Ferralic Arenosols Mollic Solonchaks
249	Calcaric Arenosols Eutric Gleysols	Calcic Solonchaks	Haplic Calcisols	Mollic Solonchaks	Eutric Regosols	Haplic Arenosols
250	Calcaric Fluvisols					
251	Haplic Arenosols					
252	Terric Histosols					
253	Fibric Histosols	Terric Histosols				

## ANNEXE B – SUPPORTING INFORMATION POUR LE DEUXIÈME MANUSCRIT

### B.1. Ecotoxicological data used to determine EFs

The following table presents the ecotoxicological data collected to determine EFs. Note that EFs calculated for options 2 to 7 are derived according to part of the data presented in the table below.

Tableau B.15 Ecotoxicological data used to derive EFs

AS	Phyla	Species	Test duration (days)	Effect	Zn conc. used	EC50 (mg <sub>Zn</sub> /kg <sub>soil</sub> )	Reference	Database	Soil pH	O M (%)	Texture	CEC meq/100g	CaCO <sub>3</sub> (%)
1314132	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	21	reproduction	Total	370,39	Lock and Janssen, 2003	ECOTOX	6	10	sandy clay loam	ND	ND
1314132	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	21	reproduction	Soluble	2,19	Lock and Janssen, 2003	ECOTOX	6	10	sandy clay loam	ND	ND
1314132	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	21	reproduction	CaCl <sub>2</sub>	13,50	Lock and Janssen, 2003	ECOTOX	6	10	sandy clay loam	ND	ND
7440666	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	reproduction	ion	865,00	Greenslade and Vaughan, 2003	ECOTOX	ND	ND	ND	ND	ND
7440666	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	21	reproduction	Total	1455,56	Lock and Janssen, 2003	ECOTOX	6	10	sandy clay loam	ND	ND
7440666	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	21	reproduction	Soluble	1,91	Lock and Janssen, 2003	ECOTOX	6	10	sandy clay loam	ND	ND
7440666	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	21	reproduction	CaCl <sub>2</sub>	9,87	Lock and Janssen, 2003	ECOTOX	6	10	sandy clay loam	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	reproduction	Total	24,23	Lock and Janssen, 2001	ECOTOX	4,4	1,46	ND	3,03	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	reproduction	Total	49,42	Lock and Janssen, 2001	ECOTOX	6,6	1,46	ND	3,06	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	reproduction	Total	63,82	Lock and Janssen, 2001	ECOTOX	5,5	0	ND	0,06	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	reproduction	Total	96,92	Lock and Janssen, 2001	ECOTOX	4	5	ND	7,77	ND

7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	reproduction	Total	142,51	Lock and Janssen, 2001	ECOTOX	5,5	5	ND	8,05	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	reproduction	Total	161,22	Lock and Janssen, 2001	ECOTOX	5,5	5	ND	8,18	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	reproduction	Total	199,61	Lock and Janssen, 2001	ECOTOX	4,4	8,5 4	ND	12,2	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	reproduction	Total	287,89	Lock and Janssen, 2001	ECOTOX	5,5	10	ND	14,1	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	reproduction	Total	314,76	Lock and Janssen, 2001	ECOTOX	7	5	ND	9	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	reproduction	Total	479,82	Lock and Janssen, 2001	ECOTOX	6,6	8,5 4	ND	13,9	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	14	mortality	Total	628,57	Lock and Janssen, 2001bis	ECOTOX	4,4	1,5	loamy sand	10,1	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	14	mortality	Total	1487,4 5	Lock and Janssen, 2001bis	ECOTOX	6,3	4,8	silt loam	11,5	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	14	mortality	Total	2471,0 9	Lock and Janssen, 2001bis	ECOTOX	6	10	sandy clay loam	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	reproduction	Total	37,28	Lock and Janssen, 2001bis	ECOTOX	4,4	1,5	loamy sand	10,1	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	reproduction	Total	250,47	Lock and Janssen, 2001bis	ECOTOX	6,3	4,8	silt loam	11,5	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	reproduction	Total	179,93	Lock and Janssen, 2001bis	ECOTOX	6	10	sandy clay loam	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	21	reproduction	Total	187,61	Lock and Janssen, 2003	ECOTOX	6	10	sandy clay loam	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	21	mortality	Total	4741,5 0	Baas et al, 2007	ECOTOX	6,95	4	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	10	mortality	Total	422,96	Xu et al, 2009	ECOTOX	6,5	2,7 52	sandy loam	20,14	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	reproduction (juvenile)	Total	36,47	lock et al 2003 [23, 25]	JRC	3	9	loamy sand	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	reproduction (juvenile)	Total	155,94	lock et al 2003 [23, 25]	JRC	5,1	4	sandy loam	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	reproduction	Total	609,38	lock et al 2003 [23, 25]	JRC	6,4	7	sandy clay loam	ND	ND

				(juvenile)									
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	reproduction (juvenile)	Total	118,52	lock et al 2003 [23, 25]	JRC	6,8	2	silt loam	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	reproduction (juvenile)	Total	547,00	lock et al 2003 [23, 25]	JRC	7,5	2	silt loam	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	reproduction (juvenile)	Total	30,71	lock et al 2003 [24, 26]	JRC	3,4	3	loamy sand	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	reproduction (juvenile)	Total	666,96	lock et al 2003 [24, 26]	JRC	4,7	40	sandy clay	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	reproduction (juvenile)	Total	189,53	lock et al 2003 [24, 26]	JRC	4,8	13	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	reproduction (juvenile)	Total	119,00	lock et al 2003 [24, 26]	JRC	4,8	1	sandy clay	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	reproduction (juvenile)	Total	690,95	lock et al 2003 [24, 26]	JRC	5,2	17	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	reproduction (juvenile)	Total	327,24	lock et al 2003 [24, 26]	JRC	5,4	1	clay	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	reproduction (juvenile)	Total	281,18	lock et al 2003 [24, 26]	JRC	5,7	6	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	reproduction (juvenile)	Total	433,28	lock et al 2003 [24, 26]	JRC	7,4	2	silty clay loam	ND	ND

				e)									
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	reproduction (juvenile)	Total	719,74	lock et al 2003 [24, 26]	JRC	7,4	4	clay	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	reproduction (juvenile)	Total	284,54	lock et al 2003 [24, 26]	JRC	7,5	1	loam	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	growth	Total	252,39	Smit & van Gestel, 1998 [8]	JRC	6	2	sand	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	reproduction	Total	125,23	Smit & van Gestel, 1998 [8]	JRC	6	2	sand	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	growth	Total	280,22	Smit & van Gestel, 1998 [8]	JRC	6	2	sand	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	reproduction	Total	256,23	Smit & van Gestel, 1998 [8]	JRC	6	2	sand	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28		Total	1045,06	Smit & van Gestel, 1998 [8]	JRC	6	2	sand	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	42	growth	Total	81,57	smit and van Gestel, 1996	ECOTOX	6	3	ND	11	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	42	growth	Total	9,98	smit and van Gestel, 1996	ECOTOX	6	3,3	ND	6,1	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	42	growth	Total	221,68	smit and van Gestel, 1996	ECOTOX	5,91	1,9	ND	1,5	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	42	population	Total	174,18	smit and van Gestel, 1996	ECOTOX	5,93	4,7	ND	0,5	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	42	population	Total	166,98	smit and van Gestel, 1996	ECOTOX	ND	ND	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	42	population	Total	100,76	smit and van Gestel, 1996	ECOTOX	5,91	6,4	ND	0,37	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	42	population	Soluble	1,55	smit and van Gestel, 1996	ECOTOX	6,2	2,4	ND	1,44	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	42	population	Soluble	1,22	smit and van Gestel, 1996	ECOTOX	6,21	3,6	ND	0,245	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	42	population	Soluble	5,42	smit and van Gestel, 1996	ECOTOX	6,09	4,3	ND	0,5	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	42	population	Soluble	4,85	smit and van Gestel, 1996	ECOTOX	6,02	5,5	ND	0,245	ND

7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	42	populat ion	CaCl <sub>2</sub> exchan geable Zn	26,68	smit and van Gestel, 1996	ECOTOX	5,91	3,6	ND	2,695	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	42	populat ion	CaCl <sub>2</sub> exchan geable Zn	23,32	smit and van Gestel, 1996	ECOTOX	6,09	2,8	ND	1,52	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	42	populat ion	CaCl <sub>2</sub> exchan geable Zn	31,04	smit and van Gestel, 1996	ECOTOX	6,02	4,5	ND	0,245	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	42	populat ion	CaCl <sub>2</sub> exchan geable Zn	32,44	smit and van Gestel, 1996	ECOTOX	6,19	3,5	ND	0,245	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	42	populat ion		88,77	smit and van Gestel, 1996	ECOTOX	ND	ND	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	35	growth	Total	219,76	smit and van Gestel, 1997	ECOTOX	ND	1,9	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	42	growth	Total	212,56	smit and van Gestel, 1997	ECOTOX	ND	1,9	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	23	growth	Total	272,06	smit and van Gestel, 1997	ECOTOX	ND	1,9	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	growth	Total	252,39	smit and van Gestel, 1997	ECOTOX	ND	1,9	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	23	reprodu ction	Total	163,62	smit and van Gestel, 1997	ECOTOX	ND	1,9	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	reprodu ction	Total	125,23	smit and van Gestel, 1997	ECOTOX	ND	1,9	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	reprodu ction	Total	127,63	smit and van Gestel, 1997	ECOTOX	ND	1,9	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	reprodu ction	Total	146,83	smit and van Gestel, 1997	ECOTOX	ND	1,9	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	42	reprodu ction	Total	117,08	smit and van Gestel, 1997	ECOTOX	ND	1,9	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	35	reprodu ction	Total	132,43	smit and van Gestel, 1997	ECOTOX	ND	1,9	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	mortali ty	Total	348,83	smit and van Gestel, 1997	ECOTOX	ND	1,9	ND	ND	ND



7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	42	mortality	Total	414,57	smit and van Gestel, 1997	ECOTOX	ND	1,9	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	mortality	Total	381,94	smit and van Gestel, 1997	ECOTOX	ND	1,9	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	42	mortality	Total	393,94	smit and van Gestel, 1997	ECOTOX	ND	1,9	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	mortality	Total	355,55	smit and van Gestel, 1997	ECOTOX	ND	1,9	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	mortality	Total	311,89	smit and van Gestel, 1997	ECOTOX	ND	1,9	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	mortality	Total	335,40	smit and van Gestel, 1997	ECOTOX	ND	1,9	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	mortality	Total	278,30	smit and van Gestel, 1997	ECOTOX	ND	1,9	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	42	growth	Soluble	39,30	smit and van Gestel, 1997	ECOTOX	ND	1,9	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	35	growth	Soluble	40,79	smit and van Gestel, 1997	ECOTOX	ND	1,9	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	growth	Soluble	54,22	smit and van Gestel, 1997	ECOTOX	ND	1,9	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	23	growth	Soluble	63,34	smit and van Gestel, 1997	ECOTOX	ND	1,9	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	reproduction	Soluble	11,71	smit and van Gestel, 1997	ECOTOX	ND	1,9	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	reproduction	Soluble	18,76	smit and van Gestel, 1997	ECOTOX	ND	1,9	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	42	reproduction	Soluble	12,91	smit and van Gestel, 1997	ECOTOX	ND	1,9	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	35	reproduction	Soluble	15,55	smit and van Gestel, 1997	ECOTOX	ND	1,9	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	reproduction	Soluble	14,25	smit and van Gestel, 1997	ECOTOX	ND	1,9	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	23	reproduction	Soluble	22,60	smit and van Gestel, 1997	ECOTOX	ND	1,9	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	reproduction	Soluble	6,05	smit and van Gestel, 1997	ECOTOX	ND	1,9	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	reproduction	Soluble	11,56	smit and van Gestel, 1997	ECOTOX	ND	1,9	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	42	reproduction	Soluble	9,50	smit and van Gestel, 1997	ECOTOX	ND	1,9	ND	ND	ND

7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	35	reproduction	Soluble	10,27	smit and van Gestel, 1997	ECOTOX	ND	1,9	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	reproduction	Soluble	9,84	smit and van Gestel, 1997	ECOTOX	ND	1,9	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	23	reproduction	Soluble	15,07	smit and van Gestel, 1997	ECOTOX	ND	1,9	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	42	growth	Soluble	30,56	smit and van Gestel, 1997	ECOTOX	ND	1,9	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	growth	Soluble	41,65	smit and van Gestel, 1997	ECOTOX	ND	1,9	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	23	growth	Soluble	48,46	smit and van Gestel, 1997	ECOTOX	ND	1,9	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	35	growth	Soluble	30,37	smit and van Gestel, 1997	ECOTOX	ND	1,9	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	42	growth	CaCl <sub>2</sub> exchangeable Zn	108,44	smit and van Gestel, 1997	ECOTOX	ND	1,9	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	35	growth	CaCl <sub>2</sub> exchangeable Zn	110,84	smit and van Gestel, 1997	ECOTOX	ND	1,9	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	growth	CaCl <sub>2</sub> exchangeable Zn	134,35	smit and van Gestel, 1997	ECOTOX	ND	1,9	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	23	growth	CaCl <sub>2</sub> exchangeable Zn	147,79	smit and van Gestel, 1997	ECOTOX	ND	1,9	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	reproduction	CaCl <sub>2</sub> exchangeable Zn	39,87	smit and van Gestel, 1997	ECOTOX	ND	1,9	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	reproduction	CaCl <sub>2</sub> exchangeable Zn	51,82	smit and van Gestel, 1997	ECOTOX	ND	1,9	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	35	reproduction	CaCl <sub>2</sub> exchangeable Zn	62,86	smit and van Gestel, 1997	ECOTOX	ND	1,9	ND	ND	ND

					Zn								
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	42	reproduction	CaCl <sub>2</sub> exchangeable Zn	56,62	smit and van Gestel, 1997	ECOTOX	ND	1,9	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	reproduction	CaCl <sub>2</sub> exchangeable Zn	59,98	smit and van Gestel, 1997	ECOTOX	ND	1,9	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	23	reproduction	CaCl <sub>2</sub> exchangeable Zn	77,73	smit and van Gestel, 1997	ECOTOX	ND	1,9	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	growth	Total	280,22	smit and van Gestel, 1998	ECOTOX	ND	2,4	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	growth	Total	589,22	smit and van Gestel, 1998	ECOTOX et JRC	6	10	sandy clay loam	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	reproduction	Total	125,23	smit and van Gestel, 1998	ECOTOX	ND	2,4	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	reproduction	Total	256,23	smit and van Gestel, 1998	ECOTOX	ND	2,4	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	growth	Total	252,39	smit and van Gestel, 1998	ECOTOX	ND	2,4	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	reproduction	Total	226,96	smit and van Gestel, 1998	ECOTOX et JRC	6	10	sandy clay loam	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	reproduction	Total	1045,06	smit and van Gestel, 1998	ECOTOX	ND	2,4	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	mortality	Total	335,40	smit and van Gestel, 1998	ECOTOX	ND	2,4	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	reproduction	Soluble	2,95	smit and van Gestel, 1998	ECOTOX	ND	2,4	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	growth	Soluble	45,58	smit and van Gestel, 1998	ECOTOX	6	10	sandy clay loam	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	growth	Soluble	54,22	smit and van Gestel, 1998	ECOTOX	ND	2,4	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	reproduction	Soluble	5,13	smit and van Gestel, 1998	ECOTOX	6	10	sandy clay loam	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	reproduction	Soluble	14,25	smit and van Gestel, 1998	ECOTOX	ND	2,4	ND	ND	ND

7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	reproduction	Soluble	9,36	smit and van Gestel, 1998	ECOTOX	ND	2,4	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	growth	Soluble	13,29	smit and van Gestel, 1998	ECOTOX	ND	2,4	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	reproduction	Soluble	5,71	smit and van Gestel, 1998	ECOTOX	6	10	sandy clay loam	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	reproduction	Soluble	13,24	smit and van Gestel, 1998	ECOTOX	ND	2,4	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	reproduction	Soluble	9,84	smit and van Gestel, 1998	ECOTOX	ND	2,4	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	growth	Soluble	46,59	smit and van Gestel, 1998	ECOTOX	6	10	sandy clay loam	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	reproduction	Soluble	10,60	smit and van Gestel, 1998	ECOTOX	ND	2,4	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	growth	Soluble	41,65	smit and van Gestel, 1998	ECOTOX	ND	2,4	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	growth	Soluble	17,23	smit and van Gestel, 1998	ECOTOX	ND	2,4	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	reproduction	CaCl2 exchangeable Zn	29,85	smit and van Gestel, 1998	ECOTOX	6	10	sandy clay loam	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	growth	CaCl2 exchangeable Zn	159,78	smit and van Gestel, 1998	ECOTOX	6	10	sandy clay loam	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	growth	CaCl2 exchangeable Zn	134,35	smit and van Gestel, 1998	ECOTOX	ND	2,4	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	reproduction	CaCl2 exchangeable Zn	159,30	smit and van Gestel, 1998	ECOTOX	ND	2,4	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	growth	CaCl2 exchangeable Zn	159,78	smit and van Gestel, 1998	ECOTOX	ND	2,4	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	29	reproduction	CaCl2 exchangeable	59,98	smit and van Gestel, 1998	ECOTOX	ND	2,4	ND	ND	ND

					Zn								
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	reproduction	CaCl <sub>2</sub> exchangeable Zn	142,51	Smit et al 1998 [9a]	ECOTOX	ND	2,4	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	mortality	Total	299,89	Smit et al 1998 [9a]	ECOTOX et JRC	4,95	2	sand	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	population	Total	239,91	Smit et al 1998 [9a]	ECOTOX et JRC	4,95	2	sand	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	population	Total	228,40	Smit et al 1998 [9a]	ECOTOX et JRC	4,95	2	sand	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	reproduction	Total	88,29	Smit et al 1998 [9a]	ECOTOX et JRC	4,95	2	sand	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	70	mortality	Total	228,40	Smit et al 1998 [9b]	ECOTOX et JRC	4,95	2	sand	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	70	reproduction	Total	186,65	Smit et al 1998 [9b]	ECOTOX et JRC	4,95	2	sand	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	mortality	Total	321,48	Smit et al 1998 [9c]	ECOTOX et JRC	4,95	2	sand	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	population	Total	296,53	Smit et al 1998 [9c]	ECOTOX et JRC	4,95	2	sand	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	growth	Total	276,86	Smit et al 1998 [9c]	JRC	4,95	2	sand	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	reproduction	Total	123,79	Smit et al 1998 [9c]	ECOTOX et JRC	4,95	2	sand	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	70	mortality	Total	520,61	Smit et al 1998 [9d]	ECOTOX et JRC	4,95	2	sand	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	70	reproduction	Total	139,63	Smit et al 1998 [9d]	ECOTOX et JRC	4,95	2	sand	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	56	reproduction	Total	469,75	Smit et al, 1997	ECOTOX	ND	ND	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	56	reproduction	Total	451,75	Smit et al, 1997	ECOTOX	ND	ND	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	56	reproduction	Total	715,42	Smit et al, 1997	ECOTOX	ND	ND	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	56	reproduction	Total	839,21	Smit et al, 1997	ECOTOX	ND	ND	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	accumulation		209,68	Smit et al, 1998	ECOTOX	ND	ND	ND	ND	ND

7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	accumulation		216,88	Smit et al, 1998	ECOTOX	ND	ND	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	accumulation		163,62	Smit et al, 1998	ECOTOX	ND	ND	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	accumulation		182,33	Smit et al, 1998	ECOTOX	ND	ND	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	population		149,23	Smit et al, 1998	ECOTOX	ND	ND	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	population		80,13	Smit et al, 1998	ECOTOX	ND	ND	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	population		74,37	Smit et al, 1998	ECOTOX	ND	ND	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	population		155,94	Smit et al, 1998	ECOTOX	ND	ND	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	population		191,93	Smit et al, 1998	ECOTOX	ND	ND	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	population		101,24	Smit et al, 1998	ECOTOX	ND	ND	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	population		110,84	Smit et al, 1998	ECOTOX	ND	ND	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	reproduction		70,53	Smit et al, 1998	ECOTOX	ND	ND	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	reproduction		9,21	Smit et al, 1998	ECOTOX	ND	ND	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	reproduction		47,89	Smit et al, 1998	ECOTOX	ND	ND	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	70	reproduction		107,48	Smit et al, 1998	ECOTOX	ND	ND	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	70	reproduction		20,63	Smit et al, 1998	ECOTOX	ND	ND	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	reproduction		71,01	Smit et al, 1998	ECOTOX	ND	ND	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	reproduction		17,37	Smit et al, 1998	ECOTOX	ND	ND	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	mortality		100,76	Smit et al, 1998	ECOTOX	ND	ND	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	mortality		194,33	Smit et al, 1998	ECOTOX	ND	ND	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	70	mortality		142,99	Smit et al, 1998	ECOTOX	ND	ND	ND	ND	ND

7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	70	mortality		36,75	Smit et al, 1998	ECOTOX	ND	ND	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	mortality		215,44	Smit et al, 1998	ECOTOX	ND	ND	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	mortality		121,88	Smit et al, 1998	ECOTOX	ND	ND	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	70	mortality		190,97	Smit et al, 1998	ECOTOX	ND	ND	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	70	mortality		356,03	Smit et al, 1998	ECOTOX	ND	ND	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	14	growth	Total	724,05	Van Gestel & Hensbergen, 1997 [16]	JRC	6	10	sandy clay loam	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	growth	Total	585,39	Van Gestel & Hensbergen, 1997 [16]	JRC	6	10	sandy clay loam	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	42	growth	Total	796,99	Van Gestel & Hensbergen, 1997 [16]	ECOTOX et JRC	6	10	sandy clay loam	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	14	growth	Total	556,60	Van Gestel & Hensbergen, 1997 [16]	JRC	6	10	sandy clay loam	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	growth	Total	576,75	Van Gestel & Hensbergen, 1997 [16]	JRC	6	10	sandy clay loam	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	42	population	Total	692,87	Van Gestel & Hensbergen, 1997 [16]	ECOTOX et JRC	6	10	sandy clay loam	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	reproduction	Total	300,37	Van Gestel & Hensbergen, 1997 [16]	JRC	6	10	sandy clay loam	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	42	reproduction	Total	327,72	Van Gestel & Hensbergen, 1997 [16]	ECOTOX et JRC	6	10	sandy clay loam	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	42	population		585,39	van Gestel and Hensbergen, 1997	ECOTOX	ND	ND	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	42	population		724,05	van Gestel and Hensbergen, 1997	ECOTOX	ND	ND	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	42	population		576,75	van Gestel and Hensbergen, 1997	ECOTOX	ND	ND	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	42	population		556,60	van Gestel and Hensbergen, 1997	ECOTOX	ND	ND	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	42	reproduction		300,37	van Gestel and Hensbergen, 1997	ECOTOX	ND	ND	ND	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	21	reproduction	Soluble	7,58	Lock and Janssen, 2003	ECOTOX	6	10	sandy clay loam	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	21	reproduction	CaCl2	32,05	Lock and Janssen, 2003	ECOTOX	6	10	sandy clay loam	ND	ND



7779886	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	reproduction	Total	310,77	Sandifer and Hopkin, 1996	ECOTOX et JRC	6	10	sandy clay loam	ND	ND
7779886	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	reproduction	Total	207,18	Sandifer and Hopkin, 1996	ECOTOX et JRC	5	10	sandy clay loam	ND	ND
7779886	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	reproduction	Total	203,73	Sandifer and Hopkin, 1996	ECOTOX et JRC	4,5	10	sandy clay loam	ND	ND
7779886	Insects/spiders	<i>Folsomia candida</i>	28	reproduction	Total	203,73	Sandifer and Hopkin, 1997	ECOTOX et JRC	6	10	sandy clay loam	ND	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Sinella curviseta</i>	28	growth	Total	1612,21	Xu et al, 2009	ECOTOX	6,5	2,752	sandy loam	20,14	ND
7646857	Insects/spiders	<i>Sinella curviseta</i>	28	reproduction	Total	1324,31	Xu et al, 2009	ECOTOX	6,5	2,752	sandy loam	20,14	ND
7733020	Worms	<i>Acrobeles sp.</i>	182,64	population	Total	24,31	Korthals et al, 2000	ECOTOX	4,95	3,268	loamy sand	3,6	ND
7733020	Worms	<i>Acrobeles sp.</i>	182,64	population	CaCl2	8,51	Korthals et al, 2000	ECOTOX	4,95	3,268	loamy sand	3,6	ND
7733020	Worms	<i>Acrobeloides sp.</i>	14	population		199,77	Korthals et al, 1996	ECOTOX	4,95	3,268	loamy sand	3,6	ND
7733020	Worms	<i>Acrobeloides sp.</i>	182,64	population	Total	88,74	Korthals et al, 2000	ECOTOX	4,95	3,268	loamy sand	3,6	ND
7733020	Worms	<i>Acrobeloides sp.</i>	182,64	population	CaCl2	49,84	Korthals et al, 2000	ECOTOX	4,95	3,268	loamy sand	3,6	ND
7733020	Worms	<i>Aphelenchoides sp.</i>	14	population		213,54	Korthals et al, 1996	ECOTOX	4,95	3,268	loamy sand	3,6	ND
7733020	Worms	<i>Aporcelaimellus sp.</i>	14	population		58,75	Korthals et al, 1996	ECOTOX	4,95	3,268	loamy sand	3,6	ND
7733020	Worms	<i>Aporrectodea caliginosa</i>	42	growth		461,07	Khalil et al, 1996	ECOTOX	7,05	21,6	ND	767,35	ND
7733020	Worms	<i>Aporrectodea caliginosa</i>	42	growth		186,80	Khalil et al, 1996	ECOTOX et JRC	7,05	21,6	ND	767,35	ND
7779886	Worms	<i>Aporrectodea caliginosa</i>	0-42	cells		87,02	Spurgeon et al, 2000	ECOTOX	6,35	2,35	sandy loam	ND	ND
7779886	Worms	<i>Aporrectodea caliginosa</i>	0-42	growth		299,72	Spurgeon et al, 2000	ECOTOX	6,35	2,35	sandy loam	ND	ND



7779886	Worms	<i>Aporrectodea caliginosa</i>	0-42	reproduction		152,62	Spurgeon et al, 2000	ECOTOX	6,35	2,35	sandy loam	ND	ND
7779886	Worms	<i>Aporrectodea caliginosa</i>	21	mortality		193,71	Spurgeon and Hopkin, 1996bis	ECOTOX	6	10	sandy clay loam	ND	ND
7779886	Worms	<i>Aporrectodea caliginosa</i>	0-42	mortality		585,29	Spurgeon et al, 2000	ECOTOX	6,35	2,35	sandy loam	ND	ND
7779886	Worms	<i>Aporrectodea caliginosa</i>	0-42	mortality		559,04	Spurgeon et al, 2000	ECOTOX	6,35	2,35	sandy loam	ND	ND
7733020	Worms	<i>Aporrectodea caliginosa</i>	56	reproduction		334,70	Khalil et al, 1996bis	ECOTOX	ND	ND	ND	ND	ND
7733020	Worms	<i>Aporrectodea caliginosa</i>	56	mortality		1462,79	Khalil et al, 1996bis	ECOTOX	ND	ND	ND	ND	ND
7646857	Worms	<i>Caenorhabditis elegans</i>	1	mortality		179,85	Donkin and Dusenbery, 1994	ECOTOX	6,2	1,7	sandy loam	5	ND
7646857	Worms	<i>Caenorhabditis elegans</i>	1	mortality		127,53	Donkin and Dusenbery, 1994	ECOTOX	5,1	3	sandy loam	5,8	ND
7646857	Worms	<i>Caenorhabditis elegans</i>	1	mortality		196,20	Donkin and Dusenbery, 1994	ECOTOX	6,1	3,4	loam	8	ND
7646857	Worms	<i>Caenorhabditis elegans</i>	1	mortality		274,68	Donkin and Dusenbery, 1994	ECOTOX	6,2	2,2	clay loam	10,3	ND
7779886	Worms	<i>Caenorhabditis elegans</i>	1	mortality	Total	330,63	Peredney and Williams, 2000	ECOTOX	7,12	10	sandy clay loam	ND	ND
7646857	Worms	<i>Caenorhabditis elegans</i>	1	mortality		106,76	Peredney and Williams, 2000bis	ECOTOX	ND	ND	ND	ND	ND
7646857	Worms	<i>Caenorhabditis elegans</i>	1	mortality		394,18	Peredney and Williams, 2000bis	ECOTOX	ND	ND	ND	ND	ND
7646857	Worms	<i>Caenorhabditis elegans</i>	1	mortality		34,07	Peredney and Williams, 2000bis	ECOTOX	ND	ND	ND	ND	ND

		<i>ditis elegans</i>		ty			2000bis						
7779886	Worms	<i>Caenorhabditis elegans</i>	1	mortality		93,23	Peredney and Williams, 2000bis	ECOTOX	ND	ND	ND	ND	ND
7779886	Worms	<i>Caenorhabditis elegans</i>	1	mortality		330,63	Peredney and Williams, 2000bis	ECOTOX	ND	ND	ND	ND	ND
7779886	Worms	<i>Caenorhabditis elegans</i>	1	mortality		27,11	Peredney and Williams, 2000bis	ECOTOX	ND	ND	ND	ND	ND
7646857	Worms	<i>Caenorhabditis elegans</i>	1	mortality	Total	86,37	Donkin & Dusenbery, 1994	JRC	ND	ND	ND	ND	ND
7646857	Worms	<i>Caenorhabditis elegans</i>	1	mortality	Total	61,18	Donkin & Dusenbery, 1994	JRC	ND	ND	ND	ND	ND
7646857	Worms	<i>Caenorhabditis elegans</i>	1	mortality	Total	94,05	Donkin & Dusenbery, 1994	JRC	ND	ND	ND	ND	ND
7646857	Worms	<i>Caenorhabditis elegans</i>	1	mortality	Total	131,71	Donkin & Dusenbery, 1994	JRC	ND	ND	ND	ND	ND
7646857	Worms	<i>Cognettia sphagnetorum</i>	70	mortality	TOTAL ?	298,45	Salminen et al, 2001	ECOTOX	4,31	92	ND	ND	ND
7646857	Worms	<i>Cognettia sphagnetorum</i>	70	mortality	TOTAL ?	468,79	Salminen et al, 2001	ECOTOX	4,31	92	ND	ND	ND
7646857	Worms	<i>Cognettia sphagnetorum</i>	70	mortality	TOTAL ?	462,07	Salminen et al, 2001	ECOTOX	4,31	92	ND	ND	ND
7646857	Worms	<i>Drawida willsi</i>	14	mortality	Total	366,04	Panda et al, 1999	ECOTOX	6,8	2,5	ND	ND	ND
7646857	Worms	<i>Drawida willsi</i>	14	mortality	Total	403,38	Panda et al, 1999	ECOTOX	6,8	2,5	ND	ND	ND
7646857	Worms	<i>Drawida willsi</i>	14	mortality	Total	435,59	Panda et al, 1999	ECOTOX	6,8	2,5	ND	ND	ND
7646857	Worms	<i>Eisenia andrei</i>	21	reproduction	Total	316,20	van gestel et al 1993 [18]	JRC	ND	ND	ND	ND	ND

7646857	Worms	<i>Eisenia andrei</i>	21	reproduction	Total	245,67	van gestel et al 1993 [18]	JRC	ND	ND	ND	ND	ND
1314132	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	21	reproduction	Total	613,83	Lock and Janssen, 2003	ECOTOX	6	10	sandy clay loam	ND	ND
1314132	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	21	mortality	Total	2522,80	Lock and Janssen, 2003	ECOTOX	6	10	sandy clay loam	ND	ND
1314132	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	21	reproduction	Soluble	3,21	Lock and Janssen, 2003	ECOTOX	6	10	sandy clay loam	ND	ND
1314132	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	21	reproduction	CaCl2	18,88	Lock and Janssen, 2003	ECOTOX	6	10	sandy clay loam	ND	ND
1314132	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	21	mortality	Soluble	14,38	Lock and Janssen, 2003	ECOTOX	6	10	sandy clay loam	ND	ND
1314132	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	21	mortality	CaCl2	74,16	Lock and Janssen, 2003	ECOTOX	6	10	sandy clay loam	ND	ND
7646857	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	21	reproduction	Total	141,07	Lock and Janssen, 2001bis	ECOTOX	6,3	4,8	silt loam	11,5	ND
7646857	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	21	reproduction	Total	337,80	Lock and Janssen, 2001bis	ECOTOX	6	10	sandy clay loam	ND	ND
7646857	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	14	mortality	Total	70,53	Lock and Janssen, 2001bis	ECOTOX	4,4	1,5	loamy sand	10,1	ND
7646857	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	14	mortality	Total	642,96	Lock and Janssen, 2001bis	ECOTOX	6,3	4,8	silt loam	11,5	ND
7646857	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	14	mortality	Total	642,96	Lock and Janssen, 2001bis	ECOTOX	6	10	sandy clay loam	ND	ND
7779886	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	21	growth		239,29	Spurgeon and Hopkin, 1996bis	ECOTOX	6	10	sandy clay loam	ND	ND
7779886	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	21	mortality		372,23	Spurgeon and Hopkin, 1995	ECOTOX	6,1	10	sandy clay loam	ND	ND
7779886	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	21	reproduction	Total	131,90	Spurgeon et al, 1997	ECOTOX et JRC	6	10	sandy clay loam	ND	ND
7779886	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	21	reproduction	Total	106,35	Spurgeon et al, 1997	ECOTOX et JRC	6	10	sandy clay loam	ND	ND
7779886	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	21	reproduction	Total	80,80	Spurgeon et al, 1997	ECOTOX et JRC	6	10	sandy clay loam	ND	ND
7779886	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	21	reproduction		215,12	Spurgeon and Hopkin, 1996bis	ECOTOX	6	10	sandy clay loam	ND	ND
7779886	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	0-42	reproduction		655,38	Spurgeon et al, 2000	ECOTOX	6,35	2,35	sandy loam	ND	ND
7779886	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	14	mortality	Total	551,79	Spurgeon et al, 1997	ECOTOX et JRC	6	10	sandy clay loam	ND	ND

7779886	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	14	mortality	Total	426,45	Spurgeon et al, 1997	ECOTOX et JRC	6	10	sandy clay loam	ND	ND
7779886	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	14	mortality	Total	390,54	Spurgeon et al, 1997	ECOTOX et JRC	6	10	sandy clay loam	ND	ND
7779886	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	14	mortality		228,59	Neuhauser et al, 1985	ECOTOX et JRC	6	10	sandy clay loam	ND	1
7779886	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	21	mortality		381,90	Spurgeon and Hopkin, 1996bis	ECOTOX	6	10	sandy clay loam	ND	ND
7779886	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	0-42	mortality		1087,70	Spurgeon et al, 2000	ECOTOX	6,35	2,35	sandy loam	ND	ND
7779886	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	0-42	mortality		1095,29	Spurgeon et al, 2000	ECOTOX	6,35	2,35	sandy loam	ND	ND
7646857	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	21	reproduction		245,67	van Gestel et al, 1993	ECOTOX	ND	ND	ND	ND	ND
7646857	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	21	reproduction		316,20	van Gestel et al, 1993	ECOTOX	ND	ND	ND	ND	ND
7779886	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	21	Unknown		123,27	Spurgeon and Hopkin, 1995	ECOTOX	ND	ND	ND	ND	ND
7779886	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	56	reproduction	Total	95,30	Spurgeon et al, 1994	ECOTOX et JRC	ND	ND	ND		
7779886	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	21	reproduction	Total	204,42	Spurgeon and Hopkin, 1996	ECOTOX et JRC	ND	ND	ND		
7779886	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	21	reproduction		3,63	Spurgeon and Hopkin, 1996	ECOTOX	ND	ND	ND	ND	ND
7779886	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	21	reproduction	Total	189,22	Spurgeon and Hopkin, 1996	ECOTOX et JRC	ND	ND	ND		
7779886	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	21	reproduction		15,16	Spurgeon and Hopkin, 1996	ECOTOX	ND	ND	ND	ND	ND
7779886	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	21	reproduction	Total	79,42	Spurgeon and Hopkin, 1996	ECOTOX et JRC	ND	ND	ND		
7779886	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	21	reproduction		4,28	Spurgeon and Hopkin, 1996	ECOTOX	ND	ND	ND	ND	ND
7779886	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	21	reproduction	Total	159,53	Spurgeon and Hopkin, 1996	ECOTOX et JRC	ND	ND	ND		
7779886	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	21	reproduction		6,01	Spurgeon and Hopkin, 1996	ECOTOX	ND	ND	ND	ND	ND
7779886	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	21	reproduction	Total	118,44	Spurgeon and Hopkin, 1996	ECOTOX et JRC	ND	ND	ND		
7779886	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	21	reproduction		3,52	Spurgeon and Hopkin, 1996	ECOTOX	ND	ND	ND	ND	ND

7779886	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	21	reproduction	Total	65,26	Spurgeon and Hopkin, 1996	ECOTOX	ND	ND	ND		
7779886	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	21	reproduction		2,66	Spurgeon and Hopkin, 1996	ECOTOX	ND	ND	ND	ND	ND
7779886	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	21	reproduction	Total	46,96	Spurgeon and Hopkin, 1996	ECOTOX et JRC	ND	ND	ND		
7779886	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	21	reproduction	Total	68,71	Spurgeon and Hopkin, 1996	ECOTOX et JRC	ND	ND	ND		
7779886	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	21	reproduction		4,45	Spurgeon and Hopkin, 1996	ECOTOX	ND	ND	ND	ND	ND
7779886	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	21	reproduction		3,31	Spurgeon and Hopkin, 1996	ECOTOX	ND	ND	ND	ND	ND
7779886	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	21	reproduction	Total	49,03	Spurgeon and Hopkin, 1996	ECOTOX et JRC	ND	ND	ND		
7779886	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	56	mortality	Total	257,25	Spurgeon et al, 1994	ECOTOX et JRC	ND	ND	ND		
7779886	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	56	mortality		348,75	Spurgeon et al, 1994	ECOTOX	ND	ND	ND	ND	ND
7779886	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	21	mortality		24,79	Spurgeon and Hopkin, 1996	ECOTOX	ND	ND	ND	ND	ND
7779886	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	21	mortality	Total	556,97	Spurgeon and Hopkin, 1996	ECOTOX et JRC	ND	ND	ND		
7779886	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	21	mortality		64,78	Spurgeon and Hopkin, 1996	ECOTOX	ND	ND	ND	ND	ND
7779886	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	21	mortality	Total	342,54	Spurgeon and Hopkin, 1996	ECOTOX et JRC	ND	ND	ND		
7779886	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	21	mortality	Total	163,67	Spurgeon and Hopkin, 1996	ECOTOX et JRC	ND	ND	ND		
7779886	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	21	mortality		23,45	Spurgeon and Hopkin, 1996	ECOTOX	ND	ND	ND	ND	ND
7779886	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	21	mortality		24,65	Spurgeon and Hopkin, 1996	ECOTOX	ND	ND	ND	ND	ND
7779886	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	21	mortality	Total	273,13	Spurgeon and Hopkin, 1996	ECOTOX et JRC	ND	ND	ND		
7779886	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	21	mortality	Total	207,53	Spurgeon and Hopkin, 1996	ECOTOX et JRC	ND	ND	ND		
7779886	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	21	mortality		40,43	Spurgeon and Hopkin, 1996	ECOTOX	ND	ND	ND	ND	ND
7779886	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	21	mortality		32,80	Spurgeon and Hopkin, 1996	ECOTOX	ND	ND	ND	ND	ND

7779886	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	21	mortality	Total	213,05	Spurgeon and Hopkin, 1996	ECOTOX et JRC	ND	ND	ND		
7779886	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	21	mortality		31,60	Spurgeon and Hopkin, 1996	ECOTOX	ND	ND	ND	ND	ND
7779886	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	21	mortality	Total	214,09	Spurgeon and Hopkin, 1996	ECOTOX et JRC	ND	ND	ND		
7779886	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	21	mortality	Total	204,07	Spurgeon and Hopkin, 1996	ECOTOX	ND	ND	ND		
7779886	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	21	mortality		28,52	Spurgeon and Hopkin, 1996	ECOTOX	ND	ND	ND	ND	ND
7779886	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	21	mortality	Total	155,73	Spurgeon and Hopkin, 1996	ECOTOX et JRC	ND	ND	ND		
7779886	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	21	mortality		23,38	Spurgeon and Hopkin, 1996	ECOTOX	ND	ND	ND	ND	ND
7779886	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	14	mortality		228,59	Neuhauser et al, 1986	ECOTOX	ND	ND	ND	ND	ND
7646857	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	28	reproduction	Total	119,96	Lock et al 2003 [24, 25]	JRC	ND	ND	ND	ND	ND
7646857	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	28	reproduction	Total	57,58	Lock et al 2003 [24, 25]	JRC	ND	ND	ND	ND	ND
7646857	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	28	reproduction	Total	873,28	Lock et al 2003 [24, 25]	JRC	ND	ND	ND	ND	ND
7646857	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	28	reproduction	Total	439,04	Lock et al 2003 [24, 25]	JRC	ND	ND	ND	ND	ND
7646857	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	28	reproduction	Total	311,41	Lock et al 2003 [24, 25]	JRC	ND	ND	ND	ND	ND
7646857	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	28	reproduction	Total	182,81	Lock et al 2003 [24, 25]	JRC	ND	ND	ND	ND	ND
7646857	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	28	reproduction	Total	729,33	Lock et al 2003 [24, 25]	JRC	ND	ND	ND	ND	ND
7646857	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	28	reproduction	Total	628,57	Lock et al 2003 [24, 25]	JRC	ND	ND	ND	ND	ND
7646857	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	28	reproduction	Total	508,61	Lock et al 2003 [24, 25]	JRC	ND	ND	ND	ND	ND
7646857	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	28	reproduction	Total	131,95	Lock et al 2003 [24, 25]	JRC	ND	ND	ND	ND	ND
7646857	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	28	reproduction	Total	276,86	Lock et al 2003 [24, 25]	JRC	ND	ND	ND	ND	ND
7646857	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	28	reproduction	Total	254,79	Lock et al 2003 [24, 25]	JRC	ND	ND	ND	ND	ND

7646857	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	28	reproduction	Total	83,01	lock et al 2003 [23, 24]	JRC	ND	ND	ND	ND	ND
7646857	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	28	reproduction	Total	267,26	lock et al 2003 [23, 24]	JRC	ND	ND	ND	ND	ND
7646857	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	28	reproduction	Total	364,67	lock et al 2003 [23, 24]	JRC	ND	ND	ND	ND	ND
7779886	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	14	mortality	Total	348,75	Spurgeon et al, 1994 [20]	JRC	ND	ND	ND	ND	ND
7646857	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	14	mortality	Total	517,25	Spurgeon & Hopkin, 1995 [17]	JRC	ND	ND	ND	ND	ND
7646857	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	21	reproduction	Total	171,30	Spurgeon & Hopkin, 1995 [17]	JRC	ND	ND	ND	ND	ND
7779886	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	14	mortality	Total	0,01	Callahan et al, 1994 [19]	JRC	ND	ND	ND	ND	ND
7779886	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	14	mortality	Total	228,24	Neuhauser et al, 1985 b (dans Peredney and Williams 2000)	ECOTOX	ND	ND	ND	ND	ND
7779886	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	1	mortality	Total	330,63	Spurgeon et al 1994 (dans Peredney and Williams 2000)	ECOTOX	ND	ND	ND	ND	ND
7440666	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	21	reproduction	Total	587,00	Lock and Janssen, 2003	ECOTOX	6	10	sandy clay loam	ND	ND
7440666	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	21	mortality	Total	3800,00	Lock and Janssen, 2003	ECOTOX	6	10	sandy clay loam	ND	ND
7440666	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	21	reproduction	soluble	2,71	Lock and Janssen, 2003	ECOTOX	6	10	sandy clay loam	ND	ND
7440666	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	21	reproduction	CaCl2	13,60	Lock and Janssen, 2003	ECOTOX	6	10	sandy clay loam	ND	ND
7440666	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	21	mortality	soluble	9,78	Lock and Janssen, 2003	ECOTOX	6	10	sandy clay loam	ND	ND
7440666	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	21	mortality	CaCl2	54,30	Lock and Janssen, 2003	ECOTOX	6	10	sandy clay loam	ND	ND
7646857	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	21	reproduction	Total	338,28	Lock and Janssen, 2003	ECOTOX	6	10	sandy clay loam	ND	ND
7646857	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	21	mortality	Total	642,96	Lock and Janssen, 2003	ECOTOX	6	10	sandy clay loam	ND	ND
7646857	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	21	reproduction	soluble	37,86	Lock and Janssen, 2003	ECOTOX	6	10	sandy clay loam	ND	ND
7646857	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	21	reproduction	CaCl2	75,33	Lock and Janssen, 2003	ECOTOX	6	10	sandy clay loam	ND	ND



7646857	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	21	mortality	soluble	109,40	Lock and Janssen, 2003	ECOTOX	6	10	sandy clay loam	ND	ND
7646857	Worms	<i>Eisenia fetida</i>	21	mortality	CaCl2	170,82	Lock and Janssen, 2003	ECOTOX	6	10	sandy clay loam	ND	ND
7646857	Worms	<i>Enchytraeus albidus</i>	2	avoidance		22,07	Amorim et al, 2008	ECOTOX	5,5	3,9	loamy sand	ND	ND
7646857	Worms	<i>Enchytraeus albidus</i>	42	population	TOTAL ?	128,11	Lock and Janssen, 2002tri	ECOTOX	6,85	10	sandy clay loam	ND	ND
7646857	Worms	<i>Enchytraeus albidus</i>	42	reproduction	Total	44,34	Lock and Janssen, 2001bis	ECOTOX	6,3	4,8	silt loam	11,5	ND
7646857	Worms	<i>Enchytraeus albidus</i>	42	reproduction	Total	128,11	Lock and Janssen, 2001bis	ECOTOX	6	10	sandy clay loam	ND	ND
7646857	Worms	<i>Enchytraeus albidus</i>	14	mortality	Total	179,93	Lock and Janssen, 2001bis	ECOTOX	6,3	4,8	silt loam	11,5	ND
7646857	Worms	<i>Enchytraeus albidus</i>	14	mortality	Total	271,58	Lock and Janssen, 2001bis	ECOTOX	6	10	sandy clay loam	ND	ND
7646857	Worms	<i>Enchytraeus albidus</i>	42	reproduction	Total	128,11	Lock and Janssen, 2002bis	ECOTOX	6	10	sandy clay loam	ND	ND
7646857	Worms	<i>Enchytraeus albidus</i>	42	reproduction	Total	105,08	Lock and Janssen, 2002bis	ECOTOX	6	10	sandy clay loam	ND	ND
7646857	Worms	<i>Enchytraeus albidus</i>	42	reproduction	Total	97,40	Lock and Janssen, 2002bis	ECOTOX	6	10	sandy clay loam	ND	ND
7646857	Worms	<i>Enchytraeus albidus</i>	42	reproduction	Total	84,93	Lock and Janssen, 2002bis	ECOTOX	6	10	sandy clay loam	ND	ND
7646857	Worms	<i>Enchytraeus albidus</i>	21	mortality	Total	290,77	Lock and Janssen, 2002bis	ECOTOX	6	10	sandy clay loam	ND	ND
7646857	Worms	<i>Enchytraeus albidus</i>	21	mortality	Total	312,37	Lock and Janssen, 2002bis	ECOTOX	6	10	sandy clay loam	ND	ND
7646857	Worms	<i>Enchytraeus albidus</i>	21	mortality	Total	324,84	Lock and Janssen, 2002bis	ECOTOX	6	10	sandy clay loam	ND	ND
7646857	Worms	<i>Enchytraeus albidus</i>	21	mortality	Total	247,59	Lock and Janssen, 2002bis	ECOTOX	6	10	sandy clay loam	ND	ND
7646857	Worms	<i>Enchytraeus albidus</i>	21	mortality	Total	326,76	Lock and Janssen, 2002bis	ECOTOX	6	10	sandy clay loam	ND	ND
7646857	Worms	<i>Enchytraeus albidus</i>	42	reproduction	Total	101,24	Lock and Janssen, 2002	ECOTOX	6,85	10	sandy clay loam	ND	ND
7646857	Worms	<i>Enchytraeus albidus</i>	42	reproduction	Total	165,54	Lock and Janssen, 2002	ECOTOX	6,85	10	sandy clay loam	ND	ND
7646857	Worms	<i>Enchytraeus albidus</i>	21	mortality	Total	292,69	Lock and Janssen, 2002	ECOTOX	6,85	10	sandy clay loam	ND	ND



7646857	Worms	<i>Enchytraeus albidus</i>	14	mortality		547,00	Lock and Janssen, 2001	ECOTOX	7,3	10	sandy clay loam	20,7	ND
7646857	Worms	<i>Enchytraeus albidus</i>	14	mortality		287,89	Lock and Janssen, 2001	ECOTOX	6,8	10	sandy clay loam	15,1	ND
7646857	Worms	<i>Enchytraeus albidus</i>	14	mortality		239,91	Lock and Janssen, 2001	ECOTOX	6,4	10	sandy clay loam	9	ND
7646857	Worms	<i>Enchytraeus albidus</i>	14	mortality		239,91	Lock and Janssen, 2001	ECOTOX	6,75	10	sandy clay loam	8	ND
7646857	Worms	<i>Enchytraeus albidus</i>	14	mortality		143,95	Lock and Janssen, 2001	ECOTOX	7,47	10	sandy clay loam	3,6	ND
7646857	Worms	<i>Enchytraeus albidus</i>	14	mortality		39,83	Lock and Janssen, 2001	ECOTOX	6,37	10	sandy clay loam	2,2	ND
1314132	Worms	<i>Enchytraeus albidus</i>	21	reproduction	Total	370,39	Lock and Janssen, 2003	ECOTOX	6	10	sandy clay loam	ND	ND
1314132	Worms	<i>Enchytraeus albidus</i>	21	mortality	Total	8778,32	Lock and Janssen, 2003	ECOTOX	6	10	sandy clay loam	ND	ND
1314132	Worms	<i>Enchytraeus albidus</i>	21	reproduction	soluble	2,19	Lock and Janssen, 2003	ECOTOX	6	10	sandy clay loam	ND	ND
1314132	Worms	<i>Enchytraeus albidus</i>	21	reproduction	CaCl2	13,50	Lock and Janssen, 2003	ECOTOX	6	10	sandy clay loam	ND	ND
1314132	Worms	<i>Enchytraeus albidus</i>	21	mortality	soluble	13,74	Lock and Janssen, 2003	ECOTOX	6	10	sandy clay loam	ND	ND
1314132	Worms	<i>Enchytraeus albidus</i>	21	mortality	CaCl2	80,18	Lock and Janssen, 2003	ECOTOX	6	10	sandy clay loam	ND	ND
7440666	Worms	<i>Enchytraeus albidus</i>	21	reproduction	Total	302,00	Lock and Janssen, 2003	ECOTOX	6	10	sandy clay loam	ND	ND
7440666	Worms	<i>Enchytraeus albidus</i>	21	mortality	Total	8888,89	Lock and Janssen, 2003	ECOTOX	6	10	sandy clay loam	ND	ND
7440666	Worms	<i>Enchytraeus albidus</i>	21	reproduction	soluble	1,22	Lock and Janssen, 2003	ECOTOX	6	10	sandy clay loam	ND	ND
7440666	Worms	<i>Enchytraeus albidus</i>	21	reproduction	CaCl2	7,86	Lock and Janssen, 2003	ECOTOX	6	10	sandy clay loam	ND	ND
7440666	Worms	<i>Enchytraeus albidus</i>	21	mortality	soluble	7,83	Lock and Janssen, 2003	ECOTOX	6	10	sandy clay loam	ND	ND
7440666	Worms	<i>Enchytraeus albidus</i>	21	mortality	CaCl2	41,00	Lock and Janssen, 2003	ECOTOX	6	10	sandy clay loam	ND	ND
7646857	Worms	<i>Enchytraeus albidus</i>	21	reproduction	Total	130,03	Lock and Janssen, 2003	ECOTOX	6	10	sandy clay loam	ND	ND
7646857	Worms	<i>Enchytraeus albidus</i>	21	mortality	Total	289,33	Lock and Janssen, 2003	ECOTOX	6	10	sandy clay loam	ND	ND

7646857	Worms	<i>Enchytraeus albidus</i>	21	reproduction	soluble	12,52	Lock and Janssen, 2003	ECOTOX	6	10	sandy clay loam	ND	ND
7646857	Worms	<i>Enchytraeus albidus</i>	21	reproduction	CaCl2	43,04	Lock and Janssen, 2003	ECOTOX	6	10	sandy clay loam	ND	ND
7646857	Worms	<i>Enchytraeus albidus</i>	21	mortality	soluble	27,59	Lock and Janssen, 2003	ECOTOX	6	10	sandy clay loam	ND	ND
7646857	Worms	<i>Enchytraeus albidus</i>	21	mortality	CaCl2	60,94	Lock and Janssen, 2003	ECOTOX	6	10	sandy clay loam	ND	ND
7646857	Worms	<i>Enchytraeus crypticus</i>	28	reproduction	extractable	9,74	Posthuma et al, 1997	ECOTOX	6	10	sandy clay loam	ND	ND
7646857	Worms	<i>Enchytraeus crypticus</i>	28	reproduction	Total	161,22	Posthuma et al, 1997	ECOTOX et JRC	6	10	sandy clay loam	ND	ND
7646857	Worms	<i>Enchytraeus crypticus</i>	28	reproduction	soluble	1,87	Posthuma et al, 1997	ECOTOX	6	10	sandy clay loam	ND	ND
7646857	Worms	<i>Enchytraeus crypticus</i>	28	reproduction	Total	90,21	Posthuma et al, 1997	ECOTOX et JRC	6	10	sandy clay loam	ND	ND
7440666	Worms	<i>Enchytraeus crypticus</i>	28	reproduction	CaCl2 exchangeable Zn	22,90	Posthuma and Notenboom, 1996	ECOTOX	6	10	sandy clay loam	ND	ND
7440666	Worms	<i>Enchytraeus crypticus</i>	28	reproduction	Total	361,00	Posthuma and Notenboom, 1996	ECOTOX	6	10	sandy clay loam	ND	ND
7733020	Worms	<i>Eucephalobus sp.</i>	14	population		121,56	Korthals et al, 1996	ECOTOX	4,95	3,2 68	loamy sand	3,6	ND
7733020	Worms	<i>Eucephalobus</i>	182,64	population	CaCl2	12,16	Korthals et al, 2000	ECOTOX	4,95	3,2 68	loamy sand	3,6	ND
7733020	Worms	<i>Filenchus sp.</i>	14	population		57,13	Korthals et al, 1996	ECOTOX	4,95	3,2 68	loamy sand	3,6	ND
7779886	Worms	<i>Lumbricus rubellus</i>	0-42	cells		58,01	Spurgeon et al, 2000	ECOTOX	6,35	2,3 5	sandy loam	ND	ND
7779886	Worms	<i>Lumbricus rubellus</i>	42	growth	Total	524,86	Spurgeon and Hopkin, 1999	ECOTOX	5,82	20, 1	ND	ND	ND
7779886	Worms	<i>Lumbricus rubellus</i>	42	growth	Total	451,65	Spurgeon and Hopkin, 1999	ECOTOX	7,36	20, 7	ND	ND	ND
7779886	Worms	<i>Lumbricus rubellus</i>	42	growth	Total	449,24	Spurgeon and Hopkin, 1999	ECOTOX	6,19	23, 3	ND	ND	ND
7779886	Worms	<i>Lumbricus rubellus</i>	21	reproduction		120,16	Spurgeon and Hopkin, 1996bis	ECOTOX	6	10	sandy clay loam	ND	ND
7779886	Worms	<i>Lumbricus rubellus</i>	0-42	reproduction		206,84	Spurgeon et al, 2000	ECOTOX	6,35	2,3 5	sandy loam	ND	ND

7779886	Worms	<i>Lumbricus rubellus</i>	42	reproduction	Total	207,18	Spurgeon and Hopkin, 1999	ECOTOX	5,82	20,1	ND	ND	ND
7779886	Worms	<i>Lumbricus rubellus</i>	42	reproduction	Total	301,79	Spurgeon and Hopkin, 1999	ECOTOX	7,36	20,7	ND	ND	ND
7779886	Worms	<i>Lumbricus rubellus</i>	42	reproduction	Total	302,48	Spurgeon and Hopkin, 1999	ECOTOX	6,19	23,3	ND	ND	ND
7779886	Worms	<i>Lumbricus rubellus</i>	21	mortality		251,38	Spurgeon and Hopkin, 1996bis	ECOTOX	6	10	sandy clay loam	ND	ND
7779886	Worms	<i>Lumbricus rubellus</i>	0-42	mortality		590,12	Spurgeon et al, 2000	ECOTOX	6,35	2,35	sandy loam	ND	ND
7779886	Worms	<i>Lumbricus rubellus</i>	0-42	mortality		598,75	Spurgeon et al, 2000	ECOTOX	6,35	2,35	sandy loam	ND	ND
7779886	Worms	<i>Lumbricus rubellus</i>	42	mortality	Total	491,71	Spurgeon and Hopkin, 1999	ECOTOX	5,82	20,1	ND	ND	ND
7779886	Worms	<i>Lumbricus rubellus</i>	42	mortality	Total	436,46	Spurgeon and Hopkin, 1999	ECOTOX	7,36	20,7	ND	ND	ND
7779886	Worms	<i>Lumbricus rubellus</i>	42	mortality	Total	500,69	Spurgeon and Hopkin, 1999	ECOTOX	6,19	23,3	ND	ND	ND
7779886	Worms	<i>Lumbricus terrestris</i>	0-42	cells		187,15	Spurgeon et al, 2000	ECOTOX	6,35	2,35	sandy loam	ND	ND
7779886	Worms	<i>Lumbricus terrestris</i>	0-42	reproduction		355,31	Spurgeon et al, 2000	ECOTOX	6,35	2,35	sandy loam	ND	ND
7779886	Worms	<i>Lumbricus terrestris</i>	0-42	mortality		765,53	Spurgeon et al, 2000	ECOTOX	6,35	2,35	sandy loam	ND	ND
7779886	Worms	<i>Lumbricus terrestris</i>	0-42	mortality		821,13	Spurgeon et al, 2000	ECOTOX	6,35	2,35	sandy loam	ND	ND
7733020	Worms	<i>Nemata</i>	182,64	population	Total	119,54	Korthals et al, 2000	ECOTOX	4,95	3,268	loamy sand	3,6	ND
7733020	Worms	<i>Nemata</i>	182,64	population	CaCl2	82,66	Korthals et al, 2000	ECOTOX	4,95	3,268	loamy sand	3,6	ND
7733020	Worms	<i>Nemata</i>	182,64	population	Total	90,77	Korthals et al, 2000	ECOTOX	4,95	3,268	loamy sand	3,6	ND
7733020	Worms	<i>Nemata</i>	182,64	population	CaCl2	51,06	Korthals et al, 2000	ECOTOX	4,95	3,268	loamy sand	3,6	ND
7646857	Worms	<i>Perionyx sansibaricus</i>	14	mortality		386,32	Sinha et al, 2001	ECOTOX	ND	ND	ND	ND	ND
7646857	Worms	<i>Perionyx sansibaricus</i>	14	mortality		427,37	Sinha et al, 2001	ECOTOX	ND	ND	ND	ND	ND

7646857	Worms	<i>Perionyx sansibaricus</i>	14	mortality		472,79	Sinha et al, 2001	ECOTOX	ND	ND	ND	ND	ND
7733020	Worms	<i>Plectus sp.</i>	14	population		21,07	Korthals et al, 1996	ECOTOX	4,95	3,268	loamy sand	3,6	ND
7733020	Worms	<i>Pratylenchus sp.</i>	182,64	population	Total	109,00	Korthals et al, 2000	ECOTOX	4,95	3,268	loamy sand	3,6	ND
7733020	Worms	<i>Pratylenchus sp.</i>	182,64	population	CaCl2	67,26	Korthals et al, 2000	ECOTOX	4,95	3,268	loamy sand	3,6	ND
7733020	Worms	<i>Pratylenchus sp.</i>	14	population		365,49	Korthals et al, 1996	ECOTOX	ND	ND	ND	ND	ND
7733020	Worms	<i>Rhabditidae</i>	14	population		623,20	Korthals et al, 1996	ECOTOX	4,95	3,268	loamy sand	3,6	ND
7733020	Worms	<i>Rhabditidae</i>	14	population		179,91	Korthals et al, 1996	ECOTOX	4,95	3,268	loamy sand	3,6	ND
7733020	Worms	<i>Tylenchorhynchus sp.</i>	14	population		287,70	Korthals et al, 1996	ECOTOX	4,95	3,268	loamy sand	3,6	ND
7733020	Worms	<i>Tylenchorhynchus</i>	182,64	population	CaCl2	52,27	Korthals et al, 2000	ECOTOX	4,95	3,268	loamy sand	3,6	ND
7440666	Worms		ND			142,00	R072_0407_env European Union Risk Assessment report for Zinc metal / CAS n°7440-66-6, 2nd priority list, 343p.	INERIS	ND	ND	ND	ND	ND
7733020	Flowers, Trees, Shrubs, Ferns	<i>Brassica rapa</i>	ND	development	Total	30,39	Sheppard et al 1993	ECOTOX	6,3	ND	sand	1	ND
7733020	Flowers, Trees, Shrubs, Ferns	<i>Brassica rapa</i>	ND	development	Total	324,16	Sheppard et al 1993	ECOTOX	7,3	89	"potting soil"	40	ND
7733020	Flowers, Trees, Shrubs, Ferns	<i>Brassica rapa</i>	ND	development	Total	324,16	Sheppard et al 1993	ECOTOX	7,9	27	clay	1,8	ND
7733020	Flowers, Trees, Shrubs, Ferns	<i>Brassica rapa</i>	ND	growth	Total	30,39	Sheppard et al 1993	ECOTOX	6,3	ND	sand	1	ND
7733020	Flowers, Trees, Shrubs, Ferns	<i>Brassica rapa</i>	ND	growth	Total	30,39	Sheppard et al 1993	ECOTOX	6,3	ND	sand	1	ND
7733020	Flowers, Trees, Shrubs, Ferns	<i>Brassica rapa</i>	ND	growth	Total	30,39	Sheppard et al 1993	ECOTOX	6,3	ND	sand	1	ND
7733020	Flowers, Trees, Shrubs, Ferns	<i>Brassica rapa</i>	ND	growth	Total	405,20	Sheppard et al 1993	ECOTOX	7,3	89	"potting soil"	40	ND

7733020	Flowers, Trees, Shrubs, Ferns	<i>Brassica rapa</i>	ND	growth	Total	324,16	Sheppard et al 1993	ECOTOX	7,3	89	clay	40	ND
7733020	Flowers, Trees, Shrubs, Ferns	<i>Brassica rapa</i>	ND	growth	Total	405,20	Sheppard et al 1993	ECOTOX	7,3	89	"potting soil"	40	ND
7733020	Flowers, Trees, Shrubs, Ferns	<i>Brassica rapa</i>	ND	growth	Total	324,16	Sheppard et al 1993	ECOTOX	7,3	89	"potting soil"	40	ND
7733020	Flowers, Trees, Shrubs, Ferns	<i>Brassica rapa</i>	ND	growth	Total	324,16	Sheppard et al 1993	ECOTOX	7,9	27	clay	1,8	ND
7733020	Flowers, Trees, Shrubs, Ferns	<i>Brassica rapa</i>	ND	growth	Total	405,20	Sheppard et al 1993	ECOTOX	7,9	27	clay	1,8	ND
7733020	Flowers, Trees, Shrubs, Ferns	<i>Brassica rapa</i>	ND	reproduction	Total	30,39	Sheppard et al 1993	ECOTOX	6,3	ND	sand	1	ND
7733020	Flowers, Trees, Shrubs, Ferns	<i>Brassica rapa</i>	ND	reproduction	Total	324,16	Sheppard et al 1993	ECOTOX	7,3	89	"potting soil"	40	ND
7733020	Flowers, Trees, Shrubs, Ferns	<i>Brassica rapa</i>	ND	reproduction	Total	324,16	Sheppard et al 1993	ECOTOX	7,9	27	clay	1,8	ND
7733020	Flowers, Trees, Shrubs, Ferns	<i>Lactuca sativa</i>	ND	development	Total	81,04	Sheppard et al 1993	ECOTOX	6,3		sand	1	ND
7733020	Flowers, Trees, Shrubs, Ferns	<i>Lolium perenne</i>	364	population	Total	891,45	Korthals et al 1998	ECOTOX	4,95	3,2 68	loamy sand	3,6	ND
7733020	Flowers, Trees, Shrubs, Ferns	<i>Lolium perenne</i>	364	population	Total	156,00	Korthals et al 1998	ECOTOX	4,95	3,2 68	loamy sand	3,6	ND
7733020	Flowers, Trees, Shrubs, Ferns	<i>Pinus sylvestris</i>	182,64	physiology	Total	23,10	Hartley-Whitaker et al, 2000	ECOTOX	3,3	5	sandy loam	ND	ND
7646857	Flowers, Trees, Shrubs, Ferns	<i>Trifolium pratense</i>	25	yield based on weight of shoots	Total	62,86	van der Hoeven & Henzen, 1994 b, 1994c [9, 11]	JRC	5	ND	sand	ND	ND
7646857	Flowers, Trees, Shrubs, Ferns	<i>Trifolium pratense</i>	25	yield based on weight of roots	Total	32,63	van der Hoeven & Henzen, 1994 b, 1994c [9, 11]	JRC	5	ND	sand	ND	ND
7646857	Flowers, Trees, Shrubs, Ferns	<i>Trifolium pratense</i>	25	yield based on weight of	Total	36,47	van der Hoeven & Henzen 1994, c; Hooftman & Henzen, 1996 [9, 12, 12a]	JRC	5,3	2	sand	ND	ND

				shoots									
7646857	Flowers, Trees, Shrubs, Ferns	<i>Trifolium pratense</i>	25	yield based on weight of roots	Total	25,43	van der Hoeven & Henzen 1994, c; Hooftman & Henzen, 1996 [9, 12, 12a]	JRC	5,3	2	sand	ND	ND
7646857	Flowers, Trees, Shrubs, Ferns	<i>Trifolium pratense</i>	25	yield based on weight of shoots	Total	35,03	Hooftman & Henzen, 1996 [9, 12, 12a]	JRC	5,3	2	sand	ND	ND
7646857	Flowers, Trees, Shrubs, Ferns	<i>Trifolium pratense</i>	25	yield based on weight of roots	Total	29,27	Hooftman & Henzen, 1996 [9, 12, 12a]	JRC	5,3	2	sand	ND	ND
7646857	Flowers, Trees, Shrubs, Ferns	<i>Trifolium pratense</i>	25	yield based on weight of shoots	Total	55,66	Hooftman & Henzen, 1996 [9, 12, 12a]	JRC	5,3	2	sand	ND	ND
7646857	Flowers, Trees, Shrubs, Ferns	<i>Trifolium pratense</i>	25	yield based on weight of roots	Total	45,58	Hooftman & Henzen, 1996 [9, 12, 12a]	JRC	5,3	2	sand	ND	ND
7646857	Flowers, Trees, Shrubs, Ferns	<i>Trifolium pratense</i>	25	yield based on weight of shoots	Total	69,57	Hooftman & Henzen, 1996 [9, 12, 12a]	JRC	5,3	2	sand	ND	ND
7646857	Flowers, Trees, Shrubs, Ferns	<i>Trifolium pratense</i>	25	yield based on weight of roots	Total	70,05	Hooftman & Henzen, 1996 [9, 12, 12a]	JRC	5,3	2	sand	ND	ND
7646857	Flowers, Trees,	<i>Trifolium</i>	25	yield	Total	80,13	Hooftman & Henzen, 1996	JRC	5,3	2	sand	ND	ND

	Shrubs, Ferns	<i>pratense</i>		based on weight of shoots			[9, 12, 12a]						
7646857	Flowers, Trees, Shrubs, Ferns	<i>Trifolium pratense</i>	25	yield based on weight of roots	Total	79,17	Hooftman & Henzen, 1996 [9, 12, 12a]	JRC	5,3	2	sand	ND	ND
7646857	Flowers, Trees, Shrubs, Ferns	<i>Trifolium pratense</i>	25	yield based on weight of shoots	Total	341,15	Hooftman & Henzen, 1996b [9, 12, 12a], Posthuma et al, 1998	JRC	5,3	2	sand	ND	ND
7646857	Flowers, Trees, Shrubs, Ferns	<i>Trifolium pratense</i>	25	yield based on weight of roots	TOTAL*	292,69	Hooftman & Henzen, 1996b [9, 12, 12a], Posthuma et al, 1998	JRC	5,3	2	sand	ND	ND
7646857	Flowers, Trees, Shrubs, Ferns	<i>Trifolium pratense</i>	25	yield based on weight of shoots	Total	247,59	Hooftman & Henzen, 1996b [9, 12, 12a], Posthuma et al, 1998	JRC	5,3	2	sand	ND	ND
7646857	Flowers, Trees, Shrubs, Ferns	<i>Trifolium pratense</i>	25	yield based on weight of roots	TOTAL*	224,08	Hooftman & Henzen, 1996b [9, 12, 12a], Posthuma et al, 1998	JRC	5,3	2	sand	ND	ND
7646857	Flowers, Trees, Shrubs, Ferns	<i>Trifolium pratense</i>	25	yield based on weight of shoots	Total	503,82	hooftman & henzen 1996 [9, 12, 12c] Posthuma et al, 1998	JRC	5,3	2	sand	ND	ND
7646857	Flowers, Trees, Shrubs, Ferns	<i>Trifolium pratense</i>	25	yield based on	TOTAL*	427,04	hooftman & henzen 1996 [9, 12, 12c] Posthuma et al, 1998	JRC	5,3	2	sand	ND	ND

				weight of shoots									
7646857	Flowers, Trees, Shrubs, Ferns	<i>Triticum aestivum</i>	21	yield based on weight of shoots	Total	29,27	Smolders et al, 2003 [13]	JRC	3	9	loamy sand	ND	ND
7646857	Flowers, Trees, Shrubs, Ferns	<i>Triticum aestivum</i>	21	yield based on weight of shoots	Total	23,03	Smolders et al, 2003 [13]	JRC	3,4	3	loamy sand	ND	ND
7646857	Flowers, Trees, Shrubs, Ferns	<i>Triticum aestivum</i>	21	yield based on weight of shoots	Total	526,85	Smolders et al, 2003 [13]	JRC	4,7	40	sandy clay loam	ND	ND
7646857	Flowers, Trees, Shrubs, Ferns	<i>Triticum aestivum</i>	21	yield based on weight of shoots	Total	302,77	Smolders et al, 2003 [13]	JRC	4,8	13	ND	ND	ND
7646857	Flowers, Trees, Shrubs, Ferns	<i>Triticum aestivum</i>	21	yield based on weight of shoots	Total	385,30	Smolders et al, 2003 [13]	JRC	4,8	1	sandy clay	ND	ND
7646857	Flowers, Trees, Shrubs, Ferns	<i>Triticum aestivum</i>	21	yield based on weight of shoots	Total	178,97	Smolders et al, 2003 [13]	JRC	5,1	4	sandy loam	ND	ND
7646857	Flowers, Trees, Shrubs, Ferns	<i>Triticum aestivum</i>	21	yield based	Total	512,93	Smolders et al, 2003 [13]	JRC	5,2	17	ND	ND	ND



				on weight of shoots									
7646857	Flowers, Trees, Shrubs, Ferns	<i>Triticum aestivum</i>	21	yield based on weight of shoots	Total	492,30	Smolders et al, 2003 [13]	JRC	5,4	1	clay	ND	ND
7646857	Flowers, Trees, Shrubs, Ferns	<i>Triticum aestivum</i>	21	yield based on weight of shoots	Total	354,11	Smolders et al, 2003 [13]	JRC	5,7	6	ND	ND	ND
7646857	Flowers, Trees, Shrubs, Ferns	<i>Triticum aestivum</i>	21	yield based on weight of shoots	Total	316,20	Smolders et al, 2003 [13]	JRC	6,8	2	silt loam	ND	ND
7646857	Flowers, Trees, Shrubs, Ferns	<i>Triticum aestivum</i>	21	yield based on weight of shoots	Total	852,65	Smolders et al, 2003 [13]	JRC	7,4	2	silty clay loam	ND	ND
7646857	Flowers, Trees, Shrubs, Ferns	<i>Triticum aestivum</i>	21	yield based on weight of shoots	Total	869,92	Smolders et al, 2003 [13]	JRC	7,4	4	clay	ND	ND
7646857	Flowers, Trees, Shrubs, Ferns	<i>Triticum aestivum</i>	21	yield based on weight of shoots	Total	590,18	Smolders et al, 2003 [13]	JRC	7,5	2	silt loam	ND	ND

7646857	Flowers, Trees, Shrubs, Ferns	<i>Triticum aestivum</i>	21	yield based on weight of shoots	Total	258,15	Smolders et al, 2003 [13]	JRC	7,5	1	loam	ND	ND
7646857	Flowers, Trees, Shrubs, Ferns	<i>Vicia sativa</i>	24	yield based on weight of shoots	Total	84,45	van der Hoeven & Henzen, 1994 b [9, 11]	JRC	5	ND	sand	ND	ND
7646857	Flowers, Trees, Shrubs, Ferns	<i>Vicia sativa</i>	24	yield based on weight of roots	Total	52,30	van der Hoeven & Henzen, 1994 b [9, 11]	JRC	5	ND	sand	ND	ND
7440666	Flowers, Trees, Shrubs, Ferns		ND		Total *	53,00	R072_0407_env European Union Risk Assessment report for Zinc metal / CAS n°7440-66-6, 2nd priority list, 343p	INERIS	ND	ND	ND	ND	ND
7440666	microorganism s		NA	NA	Total*	360,00	R072_0407_env European Union Risk Assessment report for Zinc metal / CAS n°7440-66-6, 2nd priority list, 343p.	INERIS	NA	NA	NA	NA	NA
7646857	microorganism s	<i>Microbe-mediated processes</i>	28	respiration	Total	994,67	Saviozzi et al, 95 [32]	JRC	5,2	2	sandy loam	NA	NA
7646857	microorganism s	<i>Microbe-mediated processes</i>	56	respiration	Total	239,91	Doelman & Haanstra, 86	JRC	6,8	3	heavy clay	NA	NA
7646857	microorganism s	<i>Microbe-mediated processes</i>	365,25	respiration	Total	599,78	Doelman & Haanstra, 86	JRC	4,3	13	sandy peat	NA	NA
7646857	microorganism s	<i>Microbe-mediated processes</i>	56	respiration	Total	3838,59	Doelman & Haanstra, 86	JRC	4,3	13	sandy peat	NA	NA

7646857	microorganism s	<i>Microbe-mediated processes</i>	0,75	Acetate	Total	36,23	van beelen et al 94 [34a]	JRC	7,4	1	sand	NA	NA
7646857	microorganism s	<i>Microbe-mediated processes</i>	4	Acetate	Total	20,87	Doelman & Haanstra, 83;84 [6] [6a]	JRC	4,3	13	sandy peat	NA	NA
7646857	microorganism s	<i>Microbe-mediated processes</i>	3	Glucose	Total	175,38	Smolders et al 2003 [44,46]	JRC	3	9	loamy sand	NA	NA
7646857	microorganism s	<i>Microbe-mediated processes</i>	3	Glucose	Total	33,35	Smolders et al 2003 [44,46]	JRC	3,4	3	loamy sand	NA	NA
7646857	microorganism s	<i>Microbe-mediated processes</i>	3	Glucose	Total	856,25	Smolders et al 2003 [44,46]	JRC	4,8	13	NA	NA	NA
7646857	microorganism s	<i>Microbe-mediated processes</i>	3	Glucose	Total	244,23	Smolders et al 2003 [44,46]	JRC	4,8	1	sandy clay	NA	NA
7646857	microorganism s	<i>Microbe-mediated processes</i>	3	Glucose	Total	151,86	Smolders et al 2003 [44,46]	JRC	5,1	4	sandy loam	NA	NA
7646857	microorganism s	<i>Microbe-mediated processes</i>	3	Glucose	Total	728,13	Smolders et al 2003 [44,46]	JRC	5,2	17	NA	NA	NA
7646857	microorganism s	<i>Microbe-mediated processes</i>	3	Glucose	Total	496,14	Smolders et al 2003 [44,46]	JRC	5,4	1	clay	NA	NA
7646857	microorganism s	<i>Microbe-mediated processes</i>	3	Glucose	Total	1664,03	Smolders et al 2003 [44,46]	JRC	5,7	6	NA	NA	NA
7646857	microorganism s	<i>Microbe-mediated processes</i>	3	Glucose	Total	394,18	Smolders et al 2003 [44,46]	JRC	6,4	7	sandy clay loam	NA	NA
7646857	microorganism s	<i>Microbe-mediated processes</i>	3	Glucose	Total	94,05	Smolders et al 2003 [44,46]	JRC	6,8	2	silt loam	NA	NA
7646857	microorganism s	<i>Microbe-mediated processes</i>	3	Glucose	Total	136,27	Smolders et al 2003 [44,46]	JRC	7,4	2	silty clay	NA	NA

7646857	microorganism s	<i>Microbe-mediated processes</i>	3	Glucose	Total	226,96	Smolders et al 2003 [44,46]	JRC	7,4	4	clay	NA	NA
7646857	microorganism s	<i>Microbe-mediated processes</i>	3	Glucose	Total	124,03	Smolders et al 2003 [44,46]	JRC	7,5	2	silt loam	NA	NA
7646857	microorganism s	<i>Microbe-mediated processes</i>	3	Glucose	Total	85,17	Smolders et al 2003 [44,46]	JRC	7,5	1	loam	NA	NA
7646857	microorganism s	<i>Microbe-mediated processes</i>	28	Maize residue	Total	2454,30	Smolders et al 2003 [44,46]	JRC	3	9	loamy sand	NA	NA
7646857	microorganism s	<i>Microbe-mediated processes</i>	28	Maize residue	Total	8062,96	Smolders et al 2003 [44,46]	JRC	4,7	40	sandy clay loam	NA	NA
7646857	microorganism s	<i>Microbe-mediated processes</i>	28	Maize residue	Total	3928,32	Smolders et al 2003 [44,46]	JRC	4,8	13	NA	NA	NA
7646857	microorganism s	<i>Microbe-mediated processes</i>	28	Maize residue	Total	744,69	Smolders et al 2003 [44,46]	JRC	5,1	4	sandy loam	NA	NA
7646857	microorganism s	<i>Microbe-mediated processes</i>	28	Maize residue	Total	1807,50	Smolders et al 2003 [44,46]	JRC	5,2	17	NA	NA	NA
7646857	microorganism s	<i>Microbe-mediated processes</i>	28	Maize residue	Total	2915,89	Smolders et al 2003 [44,46]	JRC	5,7	6	NA	NA	NA
7646857	microorganism s	<i>Microbe-mediated processes</i>	28	Maize residue	Total	8226,10	Smolders et al 2003 [44,46]	JRC	6,8	2	silt loam	NA	NA
7646857	microorganism s	<i>Microbe-mediated processes</i>	28	Maize residue	Total	1470,66	Smolders et al 2003 [44,46]	JRC	7,4	2	silty clay	NA	NA
7646857	microorganism s	<i>Microbe-mediated processes</i>	28	Maize	Total	1322,87	Smolders et al 2003 [44,46]	JRC	7,4	4	clay	NA	NA

				residue									
7646857	microorganism s	<i>Microbe-mediated processes</i>	28	Maize residue	Total	847,37	Smolders et al 2003 [44,46]	JRC	7,5	2	silt loam	NA	NA
7646857	microorganism s	<i>Microbe-mediated processes</i>	28	Maize residue	Total	998,03	Smolders et al 2003 [44,46]	JRC	7,5	1	loam	NA	NA
7646857	microorganism s	<i>Microbe-mediated processes</i>	28	Maize residue	Total	13473,46	Doelman & Haanstra 83 [6, 33a]	JRC	7,7	2	sand	NA	NA
7646857	microorganism s	<i>Microbe-mediated processes</i>	28	Maize residue	Total	5805,87	Doelman & Haanstra 83 [6, 33a]	JRC	6,8	3	heavy clay	NA	NA
7646857	microorganism s	<i>Microbe-mediated processes</i>	28	Maize residue	Total	6274,66	van beelen et al 94 [34a]	JRC	8,2	2	sand	NA	NA
7646857	microorganism s	<i>Microbe-mediated processes</i>	7	Nitrification	Total	226,48	Smolders et al 2003 [44,45]	JRC	4,7	40	sandy clay loam	NA	NA
7646857	microorganism s	<i>Microbe-mediated processes</i>	7	Nitrification	Total	204,40	Smolders et al 2003 [44,45]	JRC	4,8	13	NA	NA	NA
7646857	microorganism s	<i>Microbe-mediated processes</i>	7	Nitrification	Total	45,34	Smolders et al 2003 [44,45]	JRC	4,8	1	sandy clay	NA	NA
7646857	microorganism s	<i>Microbe-mediated processes</i>	7	Nitrification	Total	53,74	Smolders et al 2003 [44,45]	JRC	5,1	NA	sandy loam	NA	NA
7646857	microorganism s	<i>Microbe-mediated processes</i>	7	Nitrification	Total	250,95	Smolders et al 2003 [44,45]	JRC	5,2	17	NA	NA	NA
7646857	microorganism s	<i>Microbe-mediated processes</i>	7	Nitrification	Total	47,74	Smolders et al 2003 [44,45]	JRC	5,4	1	clay	NA	NA

				ation									
7646857	microorganism s	<i>Microbe-mediated processes</i>	7	Nitrification	Total	98,12	Smolders et al 2003 [44,45]	JRC	5,7	6	NA	NA	NA
7646857	microorganism s	<i>Microbe-mediated processes</i>	7	Nitrification	Total	111,32	Smolders et al 2003 [44,45]	JRC	6,4	7	sandy clay loam	NA	NA
7646857	microorganism s	<i>Microbe-mediated processes</i>	7	Nitrification	Total	64,06	Smolders et al 2003 [44,45]	JRC	6,8	2	silt loam	NA	NA
7646857	microorganism s	<i>Microbe-mediated processes</i>	7	Nitrification	Total	170,34	Smolders et al 2003 [44,45]	JRC	7,4	2	silty clay	NA	NA
7646857	microorganism s	<i>Microbe-mediated processes</i>	7	Nitrification	Total	179,45	Smolders et al 2003 [44,45]	JRC	7,4	4	clay	NA	NA
7646857	microorganism s	<i>Microbe-mediated processes</i>	7	Nitrification	Total	123,07	Smolders et al 2003 [44,45]	JRC	7,5	2	silt loam	NA	NA
7646857	microorganism s	<i>Microbe-mediated processes</i>	7	Nitrification	Total	65,98	Smolders et al 2003 [44,45]	JRC	7,5	1	loam	NA	NA
7646857	microorganism s	<i>Microbe-mediated processes</i>	42	Arylsulphatase	Total	433,76	Haanstra & Doelman, 91 [6,18]	JRC	7,7	2	sand	NA	NA
7646857	microorganism s	<i>Microbe-mediated processes</i>	547,875	Arylsulphatase	Total	178,49	Haanstra & Doelman, 91 [6,18]	JRC	7,7	2	sand	NA	NA
7646857	microorganism s	<i>Microbe-mediated processes</i>	42	Arylsulphatase	Total	1041,70	Haanstra & Doelman, 91 [6,18]	JRC	5,1	6	sandy loam	NA	NA
7646857	microorganism s	<i>Microbe-mediated processes</i>	547,875	Arylsulphatase	Total	452,47	Haanstra & Doelman, 91 [6,18]	JRC	5,1	6	sandy loam	NA	NA

				phatase									
7646857	microorganism s	<i>Microbe-mediated processes</i>	42	Arylsul phatase	Total	617,53	Haanstra & Doelman, 91 [6,18]	JRC	7,4	3	silty loam	NA	NA
7646857	microorganism s	<i>Microbe-mediated processes</i>	547,875	Arylsul phatase	Total	2074,2 8	Haanstra & Doelman, 91 [6,18]	JRC	7,4	3	silty loam	NA	NA
7646857	microorganism s	<i>Microbe-mediated processes</i>	42	Arylsul phatase	Total	2651,0 3	Haanstra & Doelman, 91 [6,18]	JRC	6,8	3	heavy clay	NA	NA
7646857	microorganism s	<i>Microbe-mediated processes</i>	547,875	Arylsul phatase	Total	1353,5 8	Haanstra & Doelman, 91 [6,18]	JRC	6,8	3	heavy clay	NA	NA
7646857	microorganism s	<i>Microbe-mediated processes</i>	547,875	Arylsul phatase	Total	4615,9 1	Haanstra & Doelman, 91 [6,18]	JRC	4,3	13	sandy peat	NA	NA
7646857	microorganism s	<i>Microbe-mediated processes</i>	<7	Arylsul phatase	Total	431,84	smolders et al 03 [44, 46]	JRC	3,4	3	loamy sand	NA	NA
7646857	microorganism s	<i>Microbe-mediated processes</i>	<7	Arylsul phatase	Total	1046,0 2	smolders et al 03 [44, 46]	JRC	5,4	1	clay	NA	NA
7646857	microorganism s	<i>Microbe-mediated processes</i>	456,5625	Arylsul phatase	Total	2106,4 3	smolders et al 03 [44, 46]	JRC	6,4	7	sandy clay loam	NA	NA
7646857	microorganism s	<i>Microbe-mediated processes</i>	456,5625	Arylsul phatase	Total	1372,3 0	Doelman & Haanstra 83 [6]	JRC	7,7	2	sand	NA	NA
7646857	microorganism s	<i>Microbe-mediated processes</i>	42	Phosph atase	Total	1603,5 7	Haanstra & Doelman, 91 [6,18]	JRC	4,3	13	sandy peat	NA	NA
7646857	microorganism s	<i>Microbe-mediated processes</i>	547,875	Phosph	Total	1424,6 0	Doelman & Haanstra, 89	JRC	5,1	6	sandy loam	NA	NA

				atase									
7646857	microorganism s	<i>Microbe-mediated processes</i>	42	Phosph atase	Total	1421,7 2	Doelman & Haanstra, 89	JRC	5,1	6	sandy loam	NA	NA
7646857	microorganism s	<i>Microbe-mediated processes</i>	547,875	Phosph atase	Total	2337,7 0	Doelman & Haanstra, 89	JRC	7,4	2	silty loam	NA	NA
7646857	microorganism s	<i>Microbe-mediated processes</i>	42	Phosph atase	Total	1738,4 0	Doelman & Haanstra, 89	JRC	7,4	2	silty loam	NA	NA
7646857	microorganism s	<i>Microbe-mediated processes</i>	547,875	Phosph atase	Total	1365,1 0	Doelman & Haanstra, 89	JRC	6,8	3	heavy clay	NA	NA
7646857	microorganism s	<i>Microbe-mediated processes</i>	456,5625	Phosph atase	Total	71,97	Doelman & Haanstra 83 [6]	JRC	5,1	6	sandy loam	NA	NA
7646857	microorganism s	<i>Microbe-mediated processes</i>	456,5625	Phosph atase	Total	1425,0 8	Doelman & Haanstra 83 [6]	JRC	7,4	2	silty loam	NA	NA
7646857	microorganism s	<i>Microbe-mediated processes</i>	<7	Phosph atase	Total	1324,3 1	Doelman & Haanstra 83 [6]	JRC	6,8	3	heavy clay	NA	NA
7646857	microorganism s	<i>Microbe-mediated processes</i>	456,5625	Phosph atase	Total	1300,3 2	Doelman & Haanstra 83 [6, 6b]	JRC	7,7	2	sand	NA	NA
7646857	microorganism s	<i>Microbe-mediated processes</i>	42	Urease	Total	201,53	Doelman & Haanstra, 89	JRC	6,8	3	heavy clay	NA	NA
7646857	microorganism s	<i>Microbe-mediated processes</i>	547,875	Urease	Total	139,15	Doelman & Haanstra, 86	JRC	7,7	2	sand	NA	NA
7646857	microorganism s	<i>Microbe-mediated processes</i>	42	Urease	Total	230,32	Doelman & Haanstra, 86	JRC	7,7	2	sand	NA	NA



7646857	microorganism s	<i>Microbe-mediated processes</i>	547,875	Urease	Total	52,78	Doelman & Haanstra, 86	JRC	5,1	6	sandy loam	NA	NA
7646857	microorganism s	<i>Microbe-mediated processes</i>	42	Urease	Total	494,22	Doelman & Haanstra, 86	JRC	5,1	6	sandy loam	NA	NA
7646857	microorganism s	<i>Microbe-mediated processes</i>	42	Urease	Total	854,09	Doelman & Haanstra, 86	JRC	7,4	2	silty loam	NA	NA
7646857	microorganism s	<i>Microbe-mediated processes</i>	547,875	Urease	Total	43,18	Doelman & Haanstra, 86	JRC	7,4	2	silty loam	NA	NA
7646857	microorganism s	<i>Microbe-mediated processes</i>	547,875	Urease	Total	33,59	Doelman & Haanstra, 86	JRC	6,8	3	heavy clay	NA	NA
7646857	microorganism s	<i>Microbe-mediated processes</i>	456,5625	Urease	Total	139,15	Doelman & Haanstra 83 [6, 6b]	JRC	7,4	2	silty loam	NA	NA
7646857	microorganism s	<i>Microbe-mediated processes</i>	456,5625	Urease	Total	21,59	Doelman & Haanstra 83 [6, 6b]	JRC	6,8	3	heavy clay	NA	NA
7646857	microorganism s	<i>Microbe-mediated processes</i>	456,5625	Urease	Total	1535,4 4	Doelman & Haanstra 83 [6]	JRC	7,4	3	sandy loam	NA	NA
7646857	microorganism s	<i>Microbe-mediated processes</i>	456,5625	Urease	Total	40,79	Doelman & Haanstra 83 [6, 6b]	JRC	7,7	2	sand	NA	NA
7646857	microorganism s	<i>Microbe-mediated processes</i>	456,5625	Urease	Total	28,79	Doelman & Haanstra 83 [6, 6b]	JRC	5,1	6	sandy loam	NA	NA
7646857	microorganism s	<i>Microbe-mediated processes</i>	547,875	Glutam ic acid	Total	191,93	Doelman & Haanstra, 83;84 [6] [6a]	JRC	7,7	2	sand	NA	NA
7646857	microorganism s	<i>Microbe-mediated processes</i>	547,875	Glutam ic acid	Total	719,74	Doelman & Haanstra, 83;84 [6] [6a]	JRC	5,1	6	sandy loam	NA	NA
7646857	microorganism s	<i>Microbe-mediated processes</i>	456,5625	Proteas e	Total	1559,4 3	Doelman & Haanstra 83 [6, 6b]	JRC	5,1	6	sandy loam	NA	NA

7440666	microorganism s	<i>Microbe- mediated processes</i>	3,15	enzyme activiti es	Labile	11,67	Isabelle, 2013	Thèse Isabelle					
7440666	microorganism s	<i>Microbe- mediated processes</i>	3,15	enzyme activiti es	Soluble	10,67	Isabelle, 2013	Thèse Isabelle					

## B.2. Soil archetypes used in Plouffe *et al.* (2015) [1]

Tableau B.16 Soil archetypes used in Plouffe *et al.* (2015)

Soil archetypes	Soil texture (USDA)	pH (H <sub>2</sub> O) [12]	OM (%) [77]	CaCO <sub>3</sub> (%) [78]	CEC [79]
1	Silty clay	Basic > 7,2	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	High >15
3	Clay	Acid <6,75	Low <4	Not calcareous < 5	High >15
4	Silty clay loam	Basic > 7,2	Low <4	Low-moderately calcareous 5-25	High >15
8	Clay loam	Neutral 6,75-7,2	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	High >15
9	Clay loam	Basic > 7,2	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	High >15
10	Clay loam	Basic > 7,2	Moderate 4-9	Low-moderately calcareous 5-25	High >15
12	Silt loam	Acid <6,75	Low <4	Not calcareous < 5	Low <9
14	Silt loam	Basic > 7,2	Low <4	Not calcareous < 5	High >15
15	Loam	Acid <6,75	Low <4	Not calcareous < 5	High >15
16	Loam	Acid <6,75	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	Low <9
17	Loam	Acid <6,75	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	High >15
18	Loam	Acid <6,75	High >9	Not calcareous < 5	High >15
19	Loam	Neutral 6,75-7,2	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	High >15
20	Loam	Basic > 7,2	Low <4	Not calcareous < 5	Moderate 9-15
21	Loam	Basic > 7,2	Low <4	Low-moderately calcareous 5-25	Moderate 9-15
22	Loam	Basic > 7,2	Moderate 4-9	Low-moderately calcareous 5-25	High >15
23	Sandy loam	Acid <6,75	Low <4	Not calcareous < 5	Low <9
24	Sandy loam	Acid <6,75	Low <4	Not calcareous < 5	High >15

26	Sandy loam	Neutral 6,75-7,2	Low<4	Not calcareous < 5	Low <9
27	Sandy loam	Neutral 6,75-7,2	Low<4	Not calcareous < 5	High>15
29	Sandy loam	Basic > 7,2	Low<4	Not calcareous < 5	Low <9
36	Loamy sand	Acid <6,75	Low<4	Not calcareous < 5	Low <9
37	Loamy sand	Acid <6,75	Low<4	Not calcareous < 5	High>15
38	Loamy sand	Acid <6,75	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	Low <9
39	Loamy sand	Acid <6,75	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	High>15
40	Loamy sand	Acid <6,75	High >9	Not calcareous < 5	High>15
41	Sand	Acid <6,75	Low<4	Not calcareous < 5	Moderate 9-15
43	Sand	Acid <6,75	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	Low <9
50	Peat soils	Acid <6,75	High >9	Not calcareous < 5	High>15
52	Clay (heavy)	Acid <6,75	Low<4	Not calcareous < 5	Low <9
53	Clay (heavy)	Acid <6,75	Low<4	Not calcareous < 5	Moderate 9-15
54	Clay (heavy)	Acid <6,75	Low<4	Not calcareous < 5	High>15
55	Clay (heavy)	Acid <6,75	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	Moderate 9-15
56	Clay (heavy)	Acid <6,75	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	High>15
57	Clay (heavy)	Acid <6,75	High >9	Not calcareous < 5	High>15
58	Clay (heavy)	Neutral 6,75-7,2	Low<4	Not calcareous < 5	Moderate 9-15
59	Clay (heavy)	Neutral 6,75-7,2	Low<4	Not calcareous < 5	High>15
60	Clay (heavy)	Neutral 6,75-7,2	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	High>15
61	Clay (heavy)	Basic > 7,2	Low<4	Not calcareous < 5	Moderate 9-15

62	Clay (heavy)	Basic > 7,2	Low<4	Not calcareous < 5	High>15
63	Clay (heavy)	Basic > 7,2	Low<4	Low-moderately calcareous 5-25	High>15
64	Clay (heavy)	Basic > 7,2	Low<4	Highly calcareous >25	High>15
65	Clay (heavy)	Basic > 7,2	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	High>15
66	Silty clay	Acid <6,75	Low<4	Not calcareous < 5	Low <9
67	Silty clay	Acid <6,75	Low<4	Not calcareous < 5	Moderate 9-15
68	Silty clay	Acid <6,75	Low<4	Not calcareous < 5	High>15
69	Silty clay	Acid <6,75	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	Moderate 9-15
70	Silty clay	Acid <6,75	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	High>15
71	Silty clay	Acid <6,75	High >9	Not calcareous < 5	High>15
72	Silty clay	Neutral 6,75-7,2	Low<4	Not calcareous < 5	High>15
73	Silty clay	Neutral 6,75-7,2	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	High>15
74	Silty clay	Neutral 6,75-7,2	Moderate 4-9	Low-moderately calcareous 5-25	High>15
75	Silty clay	Basic > 7,2	Low<4	Not calcareous < 5	Moderate 9-15
76	Silty clay	Basic > 7,2	Low<4	Not calcareous < 5	High>15
77	Silty clay	Basic > 7,2	Low<4	Low-moderately calcareous 5-25	Moderate 9-15
78	Silty clay	Basic > 7,2	Low<4	Low-moderately calcareous 5-25	High>15
79	Silty clay	Basic > 7,2	Moderate 4-9	Low-moderately calcareous 5-25	High>15
80	Silty clay	Basic > 7,2	Moderate 4-9	Highly calcareous >25	High>15
81	Clay	Acid <6,75	Low<4	Not calcareous < 5	Low <9
82	Clay	Acid <6,75	Low<4	Not calcareous < 5	Moderate

					9-15
83	Clay	Acid <6,75	Low<4	Highly calcareous >25	High>15
84	Clay	Acid <6,75	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	Low <9
85	Clay	Acid <6,75	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	Moderate 9-15
86	Clay	Acid <6,75	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	High>15
87	Clay	Acid <6,75	Moderate 4-9	Highly calcareous >25	High>15
88	Clay	Acid <6,75	High >9	Not calcareous < 5	High>15
89	Clay	Neutral 6,75-7,2	Low<4	Not calcareous < 5	Low <9
90	Clay	Neutral 6,75-7,2	Low<4	Not calcareous < 5	Moderate 9-15
91	Clay	Neutral 6,75-7,2	Low<4	Not calcareous < 5	High>15
92	Clay	Neutral 6,75-7,2	Low<4	Low-moderately calcareous 5-25	High>15
93	Clay	Neutral 6,75-7,2	Low<4	Highly calcareous >25	High>15
94	Clay	Neutral 6,75-7,2	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	Moderate 9-15
95	Clay	Neutral 6,75-7,2	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	High>15
96	Clay	Basic > 7,2	Low<4	Not calcareous < 5	Moderate 9-15
97	Clay	Basic > 7,2	Low<4	Not calcareous < 5	High>15
98	Clay	Basic > 7,2	Low<4	Low-moderately calcareous 5-25	High>15
99	Clay	Basic > 7,2	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	Moderate 9-15
100	Clay	Basic > 7,2	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	High>15
101	Clay	Basic > 7,2	Moderate	Low-moderately	High>15

			4-9	calcareous 5-25	
102	Silty clay loam	Acid <6,75	Low<4	Not calcareous < 5	Low <9
103	Silty clay loam	Acid <6,75	Low<4	Not calcareous < 5	Moderate 9-15
104	Silty clay loam	Acid <6,75	Low<4	Not calcareous < 5	High>15
105	Silty clay loam	Acid <6,75	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	Low <9
106	Silty clay loam	Acid <6,75	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	Moderate 9-15
107	Silty clay loam	Acid <6,75	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	High>15
108	Silty clay loam	Acid <6,75	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	Moderate 9-15
109	Silty clay loam	Acid <6,75	High >9	Not calcareous < 5	High>15
110	Silty clay loam	Neutral 6,75-7,2	Low<4	Not calcareous < 5	High>15
111	Silty clay loam	Neutral 6,75-7,2	Low<4	Low-moderately calcareous 5-25	High>15
112	Silty clay loam	Neutral 6,75-7,2	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	High>15
113	Silty clay loam	Basic > 7,2	Low<4	Not calcareous < 5	Low <9
114	Silty clay loam	Basic > 7,2	Low<4	Not calcareous < 5	Moderate 9-15
115	Silty clay loam	Basic > 7,2	Low<4	Not calcareous < 5	High>15
116	Silty clay loam	Basic > 7,2	Low<4	Low-moderately calcareous 5-25	Moderate 9-15
117	Silty clay loam	Basic > 7,2	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	High>15
118	Clay loam	Acid <6,75	Low<4	Not calcareous < 5	Low <9
119	Clay loam	Acid <6,75	Low<4	Not calcareous < 5	Moderate 9-15
120	Clay loam	Acid <6,75	Low<4	Not calcareous < 5	High>15
121	Clay loam	Acid <6,75	Low<4	Low-moderately calcareous 5-25	High>15

122	Clay loam	Acid <6,75	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	Moderate 9-15
123	Clay loam	Acid <6,75	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	High>15
124	Clay loam	Acid <6,75	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	High>15
125	Clay loam	Neutral 6,75-7,2	Low<4	Not calcareous < 5	Moderate 9-15
126	Clay loam	Neutral 6,75-7,2	Low<4	Not calcareous < 5	High>15
127	Clay loam	Neutral 6,75-7,2	Low<4	Low-moderately calcareous 5-25	High>15
128	Clay loam	Basic > 7,2	Low<4	Not calcareous < 5	Low <9
129	Clay loam	Basic > 7,2	Low<4	Not calcareous < 5	Moderate 9-15
130	Clay loam	Basic > 7,2	Low<4	Not calcareous < 5	High>15
131	Clay loam	Basic > 7,2	Low<4	Low-moderately calcareous 5-25	Moderate 9-15
132	Clay loam	Basic > 7,2	Low<4	Low-moderately calcareous 5-25	High>15
133	Clay loam	Basic > 7,2	Low<4	Highly calcareous >25	Moderate 9-15
134	Clay loam	Basic > 7,2	Low<4	Highly calcareous >25	High>15
135	Clay loam	Basic > 7,2	High >9	Low-moderately calcareous 5-25	High>15
136	Silt	Acid <6,75	Low<4	Not calcareous < 5	Low <9
137	Silt loam	Acid <6,75	Low<4	Not calcareous < 5	Moderate 9-15
138	Silt loam	Acid <6,75	Low<4	Not calcareous < 5	High>15
139	Silt loam	Acid <6,75	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	Moderate 9-15
140	Silt loam	Acid <6,75	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	High>15
141	Silt loam	Acid <6,75	High >9	?	High>15



142	Silt loam	Acid <6,75	High >9	Not calcareous < 5	High>15
143	Silt loam	Neutral 6,75-7,2	Low<4	Not calcareous < 5	Low <9
144	Silt loam	Neutral 6,75-7,2	Low<4	Not calcareous < 5	High>15
145	Silt loam	Neutral 6,75-7,2	Low<4	Low-moderately calcareous 5-25	High>15
146	Silt loam	Neutral 6,75-7,2	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	High>15
147	Silt loam	Neutral 6,75-7,2	Moderate 4-9	Low-moderately calcareous 5-25	High>15
148	Silt loam	Basic > 7,2	Low<4	Not calcareous < 5	Low <9
149	Silt loam	Basic > 7,2	Low<4	Not calcareous < 5	Moderate 9-15
150	Silt loam	Basic > 7,2	Low<4	Low-moderately calcareous 5-25	Moderate 9-15
151	Silt loam	Basic > 7,2	Low<4	Low-moderately calcareous 5-25	High>15
152	Sandy clay	Acid <6,75	Low<4	Not calcareous < 5	Low <9
153	Sandy clay	Acid <6,75	Low<4	Not calcareous < 5	Moderate 9-15
154	Sandy clay	Acid <6,75	Low<4	Not calcareous < 5	High>15
155	Sandy clay	Acid <6,75	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	Moderate 9-15
156	Sandy clay	Acid <6,75	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	High>15
157	Sandy clay	Acid <6,75	High >9	Not calcareous < 5	Moderate 9-15
158	Sandy clay	Neutral 6,75-7,2	Low<4	Not calcareous < 5	Low <9
159	Sandy clay	Neutral 6,75-7,2	Low<4	Not calcareous < 5	Moderate 9-15
160	Sandy clay	Neutral 6,75-7,2	Low<4	Not calcareous < 5	High>15

161	Sandy clay	Neutral 6,75-7,2	Low<4	Low-moderately calcareous 5-25	High>15
162	Sandy clay	Basic > 7,2	Low<4	Not calcareous < 5	Moderate 9-15
163	Sandy clay	Basic > 7,2	Low<4	Not calcareous < 5	High>15
164	Sandy clay	Basic > 7,2	Low<4	Low-moderately calcareous 5-25	High>15
165	Sandy clay	Basic > 7,2	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	High>15
166	Loam	Acid <6,75	Low<4	Not calcareous < 5	Low <9
167	Loam	Acid <6,75	Low<4	Not calcareous < 5	Moderate 9-15
168	Loam	Acid <6,75	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	Moderate 9-15
169	Loam	Acid <6,75	Moderate 4-9	Low-moderately calcareous 5-25	High>15
170	Loam	Acid <6,75	High >9	Not calcareous < 5	Moderate 9-15
171	Loam	Neutral 6,75-7,2	Low<4	Not calcareous < 5	Low <9
172	Loam	Neutral 6,75-7,2	Low<4	Not calcareous < 5	Moderate 9-15
173	Loam	Neutral 6,75-7,2	Low<4	Not calcareous < 5	High>15
174	Loam	Neutral 6,75-7,2	Low<4	Low-moderately calcareous 5-25	Low <9
175	Loam	Neutral 6,75-7,2	Low<4	Low-moderately calcareous 5-25	High>15
176	Loam	Basic > 7,2	Low<4	Not calcareous < 5	Low <9
177	Loam	Basic > 7,2	Low<4	Not calcareous < 5	High>15
178	Loam	Basic > 7,2	Low<4	Low-moderately calcareous 5-25	Low <9
179	Loam	Basic > 7,2	Low<4	Low-moderately calcareous 5-25	High>15

180	Loam	Basic > 7,2	Low<4	Highly calcareous >25	Low <9
181	Loam	Basic > 7,2	Low<4	Highly calcareous >25	Moderate 9-15
182	Loam	Basic > 7,2	Low<4	Highly calcareous >25	High>15
183	Loam	Basic > 7,2	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	Moderate 9-15
184	Loam	Basic > 7,2	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	High>15
185	Loam	Basic > 7,2	High >9	Low-moderately calcareous 5-25	High>15
186	Sandy loam clay	Acid <6,75	Low<4	Not calcareous < 5	Low <9
187	Sandy loam clay	Acid <6,75	Low<4	Not calcareous < 5	Moderate 9-15
188	Sandy loam clay	Acid <6,75	Low<4	Not calcareous < 5	High>15
189	Sandy loam clay	Acid <6,75	Low<4	Low-moderately calcareous 5-25	Moderate 9-15
190	Sandy loam clay	Acid <6,75	Low<4	Low-moderately calcareous 5-25	High>15
191	Sandy loam clay	Acid <6,75	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	Low <9
192	Sandy loam clay	Acid <6,75	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	Moderate 9-15
193	Sandy loam clay	Acid <6,75	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	High>15
194	Sandy loam clay	Acid <6,75	High >9	Not calcareous < 5	High>15
195	Sandy loam clay	Neutral 6,75-7,2	Low<4	Not calcareous < 5	Low <9
196	Sandy loam clay	Neutral 6,75-7,2	Low<4	Not calcareous < 5	Moderate 9-15
197	Sandy loam clay	Neutral 6,75-7,2	Low<4	Not calcareous < 5	High>15
198	Sandy loam clay	Neutral	Low<4	Low-moderately	Moderate

	loam	6,75-7,2		calcareous 5-25	9-15
199	Sandy clay loam	Neutral 6,75-7,2	Low<4	Highly calcareous >25	Moderate 9-15
200	Sandy clay loam	Neutral 6,75-7,2	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	High>15
201	Sandy clay loam	Basic > 7,2	Low<4	Not calcareous < 5	Low <9
202	Sandy clay loam	Basic > 7,2	Low<4	Not calcareous < 5	Moderate 9-15
203	Sandy clay loam	Basic > 7,2	Low<4	Not calcareous < 5	High>15
204	Sandy clay loam	Basic > 7,2	Low<4	Low-moderately calcareous 5-25	Low <9
205	Sandy clay loam	Basic > 7,2	Low<4	Low-moderately calcareous 5-25	Moderate 9-15
206	Sandy clay loam	Basic > 7,2	Low<4	Low-moderately calcareous 5-25	High>15
207	Sandy clay loam	Basic > 7,2	Low<4	Highly calcareous >25	Moderate 9-15
208	Sandy clay loam	Basic > 7,2	Low<4	Highly calcareous >25	High>15
209	Sandy clay loam	Basic > 7,2	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	High>15
210	Sandy clay loam	Basic > 7,2	Moderate 4-9	Highly calcareous >25	High>15
211	Sandy clay loam	Basic > 7,2	High >9	Not calcareous < 5	High>15
212	Sandy loam	Acid <6,75	Low<4	Not calcareous < 5	Moderate 9-15
213	Sandy loam	Acid <6,75	Low<4	Low-moderately calcareous 5-25	High>15
214	Sandy loam	Acid <6,75	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	Low <9
215	Sandy loam	Acid <6,75	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	Moderate 9-15

216	Sandy loam	Acid <6,75	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	High>15
217	Sandy loam	Acid <6,75	High >9	Not calcareous < 5	Moderate 9-15
218	Sandy loam	Acid <6,75	High >9	Not calcareous < 5	High>15
219	Sandy loam	Neutral 6,75-7,2	Low<4	Not calcareous < 5	Moderate 9-15
220	Sandy loam	Neutral 6,75-7,2	Low<4	Low-moderately calcareous 5-25	Low <9
221	Sandy loam	Basic > 7,2	Low<4	Not calcareous < 5	Moderate 9-15
222	Sandy loam	Basic > 7,2	Low<4	Not calcareous < 5	High>15
223	Sandy loam	Basic > 7,2	Low<4	Low-moderately calcareous 5-25	Low <9
224	Sandy loam	Basic > 7,2	Low<4	Low-moderately calcareous 5-25	Moderate 9-15
225	Sandy loam	Basic > 7,2	Low<4	Low-moderately calcareous 5-25	High>15
226	Sandy loam	Basic > 7,2	Low<4	Highly calcareous >25	Low <9
227	Sandy loam	Basic > 7,2	Low<4	Highly calcareous >25	Moderate 9-15
228	Sandy loam	Basic > 7,2	Low<4	Highly calcareous >25	High>15
229	Sandy loam	Basic > 7,2	Moderate 4-9	Low-moderately calcareous 5-25	Moderate 9-15
230	Loamy sand	Acid <6,75	Low<4	Not calcareous < 5	Moderate 9-15
231	Loamy sand	Acid <6,75	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	Moderate 9-15
232	Loamy sand	Neutral 6,75-7,2	Low<4	Not calcareous < 5	Low <9
233	Loamy sand	Neutral 6,75-7,2	Low<4	Not calcareous < 5	Moderate 9-15
234	Loamy sand	Neutral 6,75-7,2	Low<4	Low-moderately calcareous 5-25	Low <9

235	Loamy sand	Basic > 7,2	Low<4	Not calcareous < 5	Low <9
236	Loamy sand	Basic > 7,2	Low<4	Not calcareous < 5	Moderate 9-15
237	Loamy sand	Basic > 7,2	Low<4	Not calcareous < 5	High>15
238	Loamy sand	Basic > 7,2	Low<4	Low-moderately calcareous 5-25	Low <9
239	Loamy sand	Basic > 7,2	Low<4	Low-moderately calcareous 5-25	Moderate 9-15
240	Loamy sand	Basic > 7,2	Low<4	Low-moderately calcareous 5-25	High>15
241	Loamy sand	Basic > 7,2	Low<4	Highly calcareous >25	Low <9
242	Loamy sand	Basic > 7,2	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	Moderate 9-15
243	Sand	Acid <6,75	Low<4	Not calcareous < 5	Low <9
244	Sand	Acid <6,75	Moderate 4-9	Not calcareous < 5	Moderate 9-15
245	Sand	Neutral 6,75-7,2	Low<4	Not calcareous < 5	Low <9
246	Sand	Neutral 6,75-7,2	Low<4	Not calcareous < 5	Moderate 9-15
247	Sand	Neutral 6,75-7,2	Low<4	Low-moderately calcareous 5-25	Low <9
248	Sand	Basic > 7,2	Low<4	Not calcareous < 5	Low <9
249	Sand	Basic > 7,2	Low<4	Low-moderately calcareous 5-25	Low <9
250	Sand	Basic > 7,2	Low<4	Low-moderately calcareous 5-25	Moderate 9-15
251	Sand	Basic > 7,2	Low<4	Low-moderately calcareous 5-25	High>15
252	Humus-bearing 15 - 30	Acid <6,75	Inf 30	Not calcareous < 5	Moderate 9-15
253	Humus-bearing 15 - 30	Acid <6,75	Inf 30	Not calcareous < 5	High>15

### B.3. Spread of CF values for the 231 soil archetypes resolution

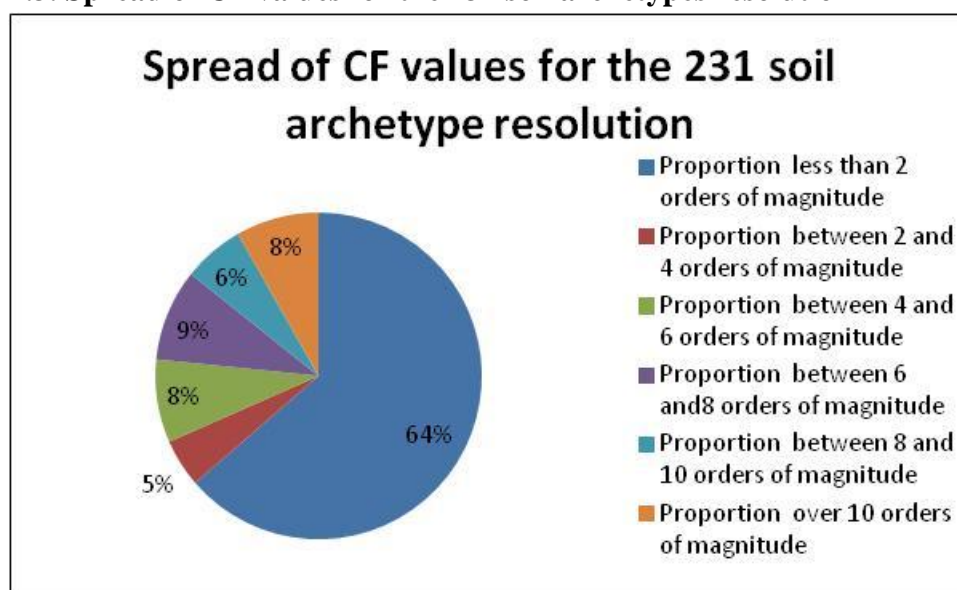


Figure B.9 Spread of CF values for the 231 archetypes resolution

### B.4. Soil archetypes (518) with new spatial resolution

Subgroups for pH, CaCO<sub>3</sub> and CEC are defined as suggested in the description of the Harmonized World Soil Database. For OM matter, two subcategories were added in order to treat humus-bearing and peat soils separately.

Tableau B.17 Description of subcategories used to define the 518 archetypes

pH		OM	CaCO <sub>3</sub> content	CEC
pH inf 4,5	extremely acid soils	low <4	None to very low <2	< 4 cmol kg <sup>-1</sup>
pH 4,5-5,5	Very acid soils	moderate 4-9	Low 2 to <5	4-10 cmol kg <sup>-1</sup>
pH 5,5-7,2	Acid to neutral soils	high >9 et <15	Moderate 5 to 15	>10-20 cmol kg <sup>-1</sup>
pH 7,2-8,5	alkaline soils	humus-bearing 15-30	High <15-40	>20-40 cmol kg <sup>-1</sup>
pH > 8,5	very alkaline soils	peat soils >30	Very high >40	>40 cmol kg <sup>-1</sup>

Tableau B.18 518 soil archetypes

Archétype v6	Soil Texture (USDA)	pH (H <sub>2</sub> O)	OM (%)	CaCO <sub>3</sub> (%)	CEC
1	Clay (heavy)	pH inf 4,5	low <4	None to very low <2	4-10 cmol kg <sup>-1</sup>
2	Clay (heavy)	pH inf 4,5	low <4	None to very low <2	>10-20 cmol kg <sup>-1</sup>
3	Clay (heavy)	pH inf	moderate 4-9	None to very	4-10 cmol

		4,5		low <2	kg -1
4	Clay (heavy)	pH inf 4,5	moderate 4-9	None to very low <2	>10-20 cmol kg-1
5	Clay (heavy)	pH inf 4,5	moderate 4-9	None to very low <2	>20-40 cmol kg-1
6	Clay (heavy)	pH inf 4,5	high>9 et <15	None to very low <2	>20-40 cmol kg-1
7	Clay (heavy)	pH 4,5-5,5	low <4	None to very low <2	< 4 cmol kg-1
8	Clay (heavy)	pH 4,5-5,5	low <4	None to very low <2	4-10 cmol kg -1
9	Clay (heavy)	pH 4,5-5,5	low <4	None to very low <2	>10-20 cmol kg-1
10	Clay (heavy)	pH 4,5-5,5	low <4	None to very low <2	>20-40 cmol kg-1
11	Clay (heavy)	pH 4,5-5,5	low <4	None to very low <2	>40 cmol kg-1
12	Clay (heavy)	pH 4,5-5,5	moderate 4-9	None to very low <2	>10-20 cmol kg-1
13	Clay (heavy)	pH 4,5-5,5	moderate 4-9	None to very low <2	>20-40 cmol kg-1
14	Clay (heavy)	pH 4,5-5,5	moderate 4-9	None to very low <2	>40 cmol kg-1
15	Clay (heavy)	pH 4,5-5,5	high>9 et <15	None to very low <2	>20-40 cmol kg-1
16	Clay (heavy)	pH 4,5-5,5	humus- bearing 15-30	None to very low <2	>20-40 cmol kg-1
17	Clay (heavy)	pH 5,5-7,2	low <4	None to very low <2	4-10 cmol kg -1
18	Clay (heavy)	pH 5,5-7,2	low <4	None to very low <2	>10-20 cmol kg-1
19	Clay (heavy)	pH 5,5-7,2	low <4	None to very low <2	>20-40 cmol kg-1
20	Clay (heavy)	pH 5,5-7,2	low <4	None to very low <2	>40 cmol kg-1
21	Clay (heavy)	pH 5,5-7,2	low <4	Low 2 to <5	>10-20 cmol kg-1
22	Clay (heavy)	pH 5,5-7,2	low <4	Low 2 to <5	>20-40 cmol kg-1
23	Clay (heavy)	pH 5,5-7,2	low <4	Low 2 to <5	>40 cmol kg-1
24	Clay (heavy)	pH 5,5-7,2	moderate 4-9	None to very low <2	>10-20 cmol kg-1



25	Clay (heavy)	pH 5,5-7,2	moderate 4-9	None to very low <2	>20-40 cmol kg-1
26	Clay (heavy)	pH 5,5-7,2	moderate 4-9	None to very low <2	>40 cmol kg-1
27	Clay (heavy)	pH 5,5-7,2	moderate 4-9	None to very low <2	>20-40 cmol kg-1
28	Clay (heavy)	pH 7,2-8,5	low <4	None to very low <2	>10-20 cmol kg-1
29	Clay (heavy)	pH 7,2-8,5	low <4	None to very low <2	>20-40 cmol kg-1
30	Clay (heavy)	pH 7,2-8,5	low <4	Low 2 to <5	>10-20 cmol kg-1
31	Clay (heavy)	pH 7,2-8,5	low <4	Low 2 to <5	>20-40 cmol kg-1
32	Clay (heavy)	pH 7,2-8,5	low <4	Low 2 to <5	>40 cmol kg-1
33	Clay (heavy)	pH 7,2-8,5	low <4	Moderate 5 to 15	>20-40 cmol kg-1
34	Clay (heavy)	pH 7,2-8,5	low <4	Moderate 5 to 15	>40 cmol kg-1
35	Clay (heavy)	pH 7,2-8,5	moderate 4-9	None to very low <2	>40 cmol kg-1
36	Clay (heavy)	pH 7,2-8,5	moderate 4-9	Low 2 to <5	>40 cmol kg-1
37	Clay (heavy)	pH > 8,5	low <4	Low 2 to <5	>10-20 cmol kg-1
38	Clay (heavy)	pH > 8,5	low <4	Low 2 to <5	>20-40 cmol kg-1
39	Clay (heavy)	pH > 8,5	low <4	Low 2 to <5	>40 cmol kg-1
40	Clay (heavy)	pH > 8,5	low <4	Moderate 5 to 15	>20-40 cmol kg-1
41	Clay (heavy)	pH > 8,5	low <4	High <15-40	>10-20 cmol kg-1
42	Clay (heavy)	pH > 8,5	low <4	Very high >40	>20-40 cmol kg-1
43	Silty clay	pH inf 4,5	low <4	None to very low <2	>10-20 cmol kg-1
44	Silty clay	pH inf 4,5	moderate 4-9	None to very low <2	>10-20 cmol kg-1
45	Silty clay	pH inf 4,5	moderate 4-9	None to very low <2	>20-40 cmol kg-1
46	Silty clay	pH inf	humus-	None to very	>20-40

		4,5	bearing 15-30	low <2	cmol kg-1
47	Silty clay	pH 4,5-5,5	low <4	None to very low <2	4-10 cmol kg -1
48	Silty clay	pH 4,5-5,5	low <4	None to very low <2	>10-20 cmol kg-1
49	Silty clay	pH 4,5-5,5	low <4	None to very low <2	>20-40 cmol kg-1
50	Silty clay	pH 4,5-5,5	moderate 4-9	None to very low <2	>10-20 cmol kg-1
51	Silty clay	pH 4,5-5,5	moderate 4-9	None to very low <2	>20-40 cmol kg-1
52	Silty clay	pH 5,5-7,2	low <4	None to very low <2	>10-20 cmol kg-1
53	Silty clay	pH 5,5-7,2	low <4	None to very low <2	>20-40 cmol kg-1
54	Silty clay	pH 5,5-7,2	low <4	None to very low <2	>40 cmol kg-1
55	Silty clay	pH 5,5-7,2	moderate 4-9	None to very low <2	>20-40 cmol kg-1
56	Silty clay	pH 5,5-7,2	moderate 4-9	None to very low <2	>40 cmol kg-1
57	Silty clay	pH 5,5-7,2	moderate 4-9	Moderate 5 to 15	>20-40 cmol kg-1
58	Silty clay	pH 5,5-7,2	moderate 4-9	Moderate 5 to 15	>40 cmol kg-1
59	Silty clay	pH 7,2-8,5	low <4	None to very low <2	>10-20 cmol kg-1
60	Silty clay	pH 7,2-8,5	low <4	Low 2 to <5	>10-20 cmol kg-1
61	Silty clay	pH 7,2-8,5	low <4	Low 2 to <5	>20-40 cmol kg-1
62	Silty clay	pH 7,2-8,5	low <4	Moderate 5 to 15	4-10 cmol kg -1
63	Silty clay	pH 7,2-8,5	low <4	Moderate 5 to 15	>20-40 cmol kg-1
64	Silty clay	pH 7,2-8,5	low <4	Moderate 5 to 15	>40 cmol kg-1
65	Silty clay	pH 7,2-8,5	moderate 4-9	Low 2 to <5	>20-40 cmol kg-1
66	Silty clay	pH 7,2-8,5	moderate 4-9	Moderate 5 to 15	>20-40 cmol kg-1
67	Silty clay	pH 7,2-8,5	moderate 4-9	Very high >40	>20-40 cmol kg-1

68	Silty clay	pH > 8,5	low <4	Low 2 to <5	>20-40 cmol kg-1
69	Silty clay	pH > 8,5	moderate 4-9	Low 2 to <5	>20-40 cmol kg-1
70	Clay	pH inf 4,5	low <4	None to very low <2	< 4 cmol kg-1
71	Clay	pH inf 4,5	low <4	None to very low <2	4-10 cmol kg -1
72	Clay	pH inf 4,5	low <4	None to very low <2	>10-20 cmol kg-1
73	Clay	pH inf 4,5	moderate 4-9	None to very low <2	4-10 cmol kg -1
74	Clay	pH inf 4,5	moderate 4-9	None to very low <2	>10-20 cmol kg-1
75	Clay	pH inf 4,5	moderate 4-9	None to very low <2	>20-40 cmol kg-1
76	Clay	pH inf 4,5	high>9 et <15	None to very low <2	>40 cmol kg-1
77	Clay	pH inf 4,5	peat soils >30	None to very low <2	>40 cmol kg-1
78	Clay	pH 4,5-5,5	low <4	None to very low <2	4-10 cmol kg -1
79	Clay	pH 4,5-5,5	low <4	None to very low <2	>10-20 cmol kg-1
80	Clay	pH 4,5-5,5	low <4	None to very low <2	>20-40 cmol kg-1
81	Clay	pH 4,5-5,5	low <4	None to very low <2	>40 cmol kg-1
82	Clay	pH 4,5-5,5	moderate 4-9	None to very low <2	< 4 cmol kg-1
83	Clay	pH 4,5-5,5	moderate 4-9	None to very low <2	4-10 cmol kg -1
84	Clay	pH 4,5-5,5	moderate 4-9	None to very low <2	>10-20 cmol kg-1
85	Clay	pH 4,5-5,5	moderate 4-9	None to very low <2	>20-40 cmol kg-1
86	Clay	pH 4,5-5,5	moderate 4-9	None to very low <2	>40 cmol kg-1
87	Clay	pH 4,5-5,5	high>9 et <15	None to very low <2	>20-40 cmol kg-1
88	Clay	pH 4,5-5,5	peat soils >30	None to very low <2	>40 cmol kg-1
89	Clay	pH	low <4	None to very	4-10 cmol

		5,5-7,2		low <2	kg -1
90	Clay	pH 5,5-7,2	low <4	None to very low <2	>10-20 cmol kg-1
91	Clay	pH 5,5-7,2	low <4	None to very low <2	>20-40 cmol kg-1
92	Clay	pH 5,5-7,2	low <4	None to very low <2	>40 cmol kg-1
93	Clay	pH 5,5-7,2	low <4	Low 2 to <5	>10-20 cmol kg-1
94	Clay	pH 5,5-7,2	low <4	Low 2 to <5	>20-40 cmol kg-1
95	Clay	pH 5,5-7,2	low <4	Low 2 to <5	>40 cmol kg-1
96	Clay	pH 5,5-7,2	low <4	Moderate 5 to 15	>20-40 cmol kg-1
97	Clay	pH 5,5-7,2	low <4	Moderate 5 to 15	>40 cmol kg-1
98	Clay	pH 5,5-7,2	low <4	High <15-40	>20-40 cmol kg-1
99	Clay	pH 5,5-7,2	low <4	Very high >40	>20-40 cmol kg-1
100	Clay	pH 5,5-7,2	moderate 4-9	None to very low <2	4-10 cmol kg -1
101	Clay	pH 5,5-7,2	moderate 4-9	None to very low <2	>10-20 cmol kg-1
102	Clay	pH 5,5-7,2	moderate 4-9	None to very low <2	>20-40 cmol kg-1
103	Clay	pH 5,5-7,2	moderate 4-9	None to very low <2	>40 cmol kg-1
104	Clay	pH 5,5-7,2	moderate 4-9	Low 2 to <5	>20-40 cmol kg-1
105	Clay	pH 5,5-7,2	moderate 4-9	Low 2 to <5	>40 cmol kg-1
106	Clay	pH 5,5-7,2	moderate 4-9	Very high >40	>20-40 cmol kg-1
107	Clay	pH 5,5-7,2	peat soils >30	None to very low <2	>20-40 cmol kg-1
108	Clay	pH 5,5-7,2	peat soils >30	None to very low <2	>40 cmol kg-1
109	Clay	pH 7,2-8,5	low <4	None to very low <2	>10-20 cmol kg-1
110	Clay	pH 7,2-8,5	low <4	None to very low <2	>20-40 cmol kg-1

111	Clay	pH 7,2-8,5	low <4	None to very low <2	>40 cmol kg-1
112	Clay	pH 7,2-8,5	low <4	Low 2 to <5	>10-20 cmol kg-1
113	Clay	pH 7,2-8,5	low <4	Low 2 to <5	>20-40 cmol kg-1
114	Clay	pH 7,2-8,5	low <4	Low 2 to <5	>40 cmol kg-1
115	Clay	pH 7,2-8,5	low <4	Moderate 5 to 15	>10-20 cmol kg-1
116	Clay	pH 7,2-8,5	low <4	Moderate 5 to 15	>20-40 cmol kg-1
117	Clay	pH 7,2-8,5	low <4	Moderate 5 to 15	>40 cmol kg-1
118	Clay	pH 7,2-8,5	low <4	High <15-40	>10-20 cmol kg-1
119	Clay	pH 7,2-8,5	low <4	High <15-40	>20-40 cmol kg-1
120	Clay	pH 7,2-8,5	moderate 4-9	None to very low <2	>10-20 cmol kg-1
121	Clay	pH 7,2-8,5	moderate 4-9	None to very low <2	>20-40 cmol kg-1
122	Clay	pH 7,2-8,5	moderate 4-9	Low 2 to <5	>10-20 cmol kg-1
123	Clay	pH 7,2-8,5	moderate 4-9	Low 2 to <5	>20-40 cmol kg-1
124	Clay	pH 7,2-8,5	moderate 4-9	Low 2 to <5	>40 cmol kg-1
125	Clay	pH 7,2-8,5	moderate 4-9	Moderate 5 to 15	>20-40 cmol kg-1
126	Clay	pH 7,2-8,5	moderate 4-9	Moderate 5 to 15	>40 cmol kg-1
127	Clay	pH > 8,5	low <4	Low 2 to <5	>10-20 cmol kg-1
128	Clay	pH > 8,5	low <4	Low 2 to <5	>20-40 cmol kg-1
129	Clay	pH > 8,5	low <4	Low 2 to <5	>40 cmol kg-1
130	Clay	pH > 8,5	low <4	Moderate 5 to 15	>20-40 cmol kg-1
131	Clay	pH > 8,5	low <4	Moderate 5 to 15	>40 cmol kg-1
132	Clay	pH > 8,5	low <4	High <15-40	>20-40 cmol kg-1

		8,5			cmol kg-1
133	Silty clay loam	pH inf 4,5	low <4	None to very low <2	4-10 cmol kg -1
134	Silty clay loam	pH inf 4,5	low <4	None to very low <2	>10-20 cmol kg-1
135	Silty clay loam	pH inf 4,5	low <4	None to very low <2	>20-40 cmol kg-1
136	Silty clay loam	pH inf 4,5	moderate 4-9	None to very low <2	4-10 cmol kg -1
137	Silty clay loam	pH inf 4,5	moderate 4-9	None to very low <2	>10-20 cmol kg-1
138	Silty clay loam	pH inf 4,5	moderate 4-9	None to very low <2	>40 cmol kg-1
139	Silty clay loam	pH inf 4,5	humus- bearing 15-30	None to very low <2	>40 cmol kg-1
140	Silty clay loam	pH 4,5-5,5	low <4	None to very low <2	< 4 cmol kg-1
141	Silty clay loam	pH 4,5-5,5	low <4	None to very low <2	4-10 cmol kg -1
142	Silty clay loam	pH 4,5-5,5	low <4	None to very low <2	>10-20 cmol kg-1
143	Silty clay loam	pH 4,5-5,5	low <4	None to very low <2	>20-40 cmol kg-1
144	Silty clay loam	pH 4,5-5,5	moderate 4-9	None to very low <2	4-10 cmol kg -1
145	Silty clay loam	pH 4,5-5,5	moderate 4-9	None to very low <2	>10-20 cmol kg-1
146	Silty clay loam	pH 4,5-5,5	moderate 4-9	None to very low <2	>20-40 cmol kg-1
147	Silty clay loam	pH 4,5-5,5	high>9 et <15	None to very low <2	>10-20 cmol kg-1
148	Silty clay loam	pH 4,5-5,5	high>9 et <15	None to very low <2	>40 cmol kg-1
149	Silty clay loam	pH 4,5-5,5	humus- bearing 15-30	None to very low <2	>40 cmol kg-1
150	Silty clay loam	pH 5,5-7,2	low <4	None to very low <2	4-10 cmol kg -1
151	Silty clay loam	pH 5,5-7,2	low <4	None to very low <2	>10-20 cmol kg-1
152	Silty clay loam	pH 5,5-7,2	low <4	None to very low <2	>20-40 cmol kg-1
153	Silty clay loam	pH 5,5-7,2	low <4	None to very low <2	>40 cmol kg-1

154	Silty clay loam	pH 5,5-7,2	low <4	Moderate 5 to 15	>20-40 cmol kg-1
155	Silty clay loam	pH 5,5-7,2	moderate 4-9	None to very low <2	>10-20 cmol kg-1
156	Silty clay loam	pH 5,5-7,2	moderate 4-9	None to very low <2	>20-40 cmol kg-1
157	Silty clay loam	pH 5,5-7,2	moderate 4-9	None to very low <2	>40 cmol kg-1
158	Silty clay loam	pH 5,5-7,2	high>9 et <15	None to very low <2	>40 cmol kg-1
159	Silty clay loam	pH 5,5-7,2	peat soils >30	None to very low <2	>40 cmol kg-1
160	Silty clay loam	pH 7,2-8,5	low <4	None to very low <2	>10-20 cmol kg-1
161	Silty clay loam	pH 7,2-8,5	low <4	None to very low <2	>20-40 cmol kg-1
162	Silty clay loam	pH 7,2-8,5	low <4	None to very low <2	>40 cmol kg-1
163	Silty clay loam	pH 7,2-8,5	low <4	Low 2 to <5	4-10 cmol kg -1
164	Silty clay loam	pH 7,2-8,5	low <4	Low 2 to <5	>10-20 cmol kg-1
165	Silty clay loam	pH 7,2-8,5	low <4	Low 2 to <5	>20-40 cmol kg-1
166	Silty clay loam	pH 7,2-8,5	low <4	Moderate 5 to 15	>10-20 cmol kg-1
167	Silty clay loam	pH 7,2-8,5	low <4	Moderate 5 to 15	>20-40 cmol kg-1
168	Silty clay loam	pH 7,2-8,5	low <4	High <15-40	>10-20 cmol kg-1
169	Silty clay loam	pH 7,2-8,5	moderate 4-9	Low 2 to <5	>20-40 cmol kg-1
170	Silty clay loam	pH 7,2-8,5	moderate 4-9	Low 2 to <5	>40 cmol kg-1
171	Silty clay loam	pH > 8,5	low <4	Low 2 to <5	>20-40 cmol kg-1
172	Clay loam	pH inf 4,5	low <4	None to very low <2	< 4 cmol kg-1
173	Clay loam	pH inf 4,5	low <4	None to very low <2	4-10 cmol kg -1
174	Clay loam	pH inf 4,5	low <4	None to very low <2	>10-20 cmol kg-1
175	Clay loam	pH inf	low <4	None to very	>20-40

		4,5		low <2	cmol kg-1
176	Clay loam	pH inf 4,5	moderate 4-9	None to very low <2	>10-20 cmol kg-1
177	Clay loam	pH inf 4,5	moderate 4-9	None to very low <2	>20-40 cmol kg-1
178	Clay loam	pH inf 4,5	high>9 et <15	None to very low <2	>20-40 cmol kg-1
179	Clay loam	pH inf 4,5	humus- bearing 15-30	None to very low <2	>40 cmol kg-1
180	Clay loam	pH 4,5-5,5	low <4	None to very low <2	4-10 cmol kg -1
181	Clay loam	pH 4,5-5,5	low <4	None to very low <2	>10-20 cmol kg-1
182	Clay loam	pH 4,5-5,5	low <4	None to very low <2	>20-40 cmol kg-1
183	Clay loam	pH 4,5-5,5	moderate 4-9	None to very low <2	4-10 cmol kg -1
184	Clay loam	pH 4,5-5,5	moderate 4-9	None to very low <2	>10-20 cmol kg-1
185	Clay loam	pH 4,5-5,5	moderate 4-9	None to very low <2	>20-40 cmol kg-1
186	Clay loam	pH 4,5-5,5	high>9 et <15	None to very low <2	>10-20 cmol kg-1
187	Clay loam	pH 4,5-5,5	high>9 et <15	None to very low <2	>40 cmol kg-1
188	Clay loam	pH 4,5-5,5	humus- bearing 15-30	None to very low <2	>40 cmol kg-1
189	Clay loam	pH 4,5-5,5	peat soils >30	None to very low <2	>40 cmol kg-1
190	Clay loam	pH 5,5-7,2	low <4	None to very low <2	4-10 cmol kg -1
191	Clay loam	pH 5,5-7,2	low <4	None to very low <2	>10-20 cmol kg-1
192	Clay loam	pH 5,5-7,2	low <4	None to very low <2	>20-40 cmol kg-1
193	Clay loam	pH 5,5-7,2	low <4	None to very low <2	>40 cmol kg-1
194	Clay loam	pH 5,5-7,2	low <4	Low 2 to <5	>10-20 cmol kg-1
195	Clay loam	pH 5,5-7,2	low <4	Low 2 to <5	>20-40 cmol kg-1
196	Clay loam	pH 5,5-7,2	low <4	Moderate 5 to 15	>10-20 cmol kg-1



197	Clay loam	pH 5,5-7,2	low <4	Moderate 5 to 15	>20-40 cmol kg-1
198	Clay loam	pH 5,5-7,2	moderate 4-9	None to very low <2	>10-20 cmol kg-1
199	Clay loam	pH 5,5-7,2	moderate 4-9	None to very low <2	>20-40 cmol kg-1
200	Clay loam	pH 5,5-7,2	moderate 4-9	None to very low <2	>40 cmol kg-1
201	Clay loam	pH 5,5-7,2	moderate 4-9	Low 2 to <5	>10-20 cmol kg-1
202	Clay loam	pH 5,5-7,2	moderate 4-9	Low 2 to <5	>20-40 cmol kg-1
203	Clay loam	pH 5,5-7,2	high>9 et <15	None to very low <2	>40 cmol kg-1
204	Clay loam	pH 5,5-7,2	humus- bearing 15-30	None to very low <2	>20-40 cmol kg-1
205	Clay loam	pH 5,5-7,2	humus- bearing 15-30	None to very low <2	>40 cmol kg-1
206	Clay loam	pH 5,5-7,2	peat soils >30	None to very low <2	>20-40 cmol kg-1
207	Clay loam	pH 5,5-7,2	peat soils >30	None to very low <2	>40 cmol kg-1
208	Clay loam	pH 7,2-8,5	low <4	None to very low <2	>10-20 cmol kg-1
209	Clay loam	pH 7,2-8,5	low <4	None to very low <2	>20-40 cmol kg-1
210	Clay loam	pH 7,2-8,5	low <4	Low 2 to <5	4-10 cmol kg -1
211	Clay loam	pH 7,2-8,5	low <4	Low 2 to <5	>10-20 cmol kg-1
212	Clay loam	pH 7,2-8,5	low <4	Low 2 to <5	>20-40 cmol kg-1
213	Clay loam	pH 7,2-8,5	low <4	Low 2 to <5	>40 cmol kg-1
214	Clay loam	pH 7,2-8,5	low <4	Moderate 5 to 15	>10-20 cmol kg-1
215	Clay loam	pH 7,2-8,5	low <4	Moderate 5 to 15	>20-40 cmol kg-1
216	Clay loam	pH 7,2-8,5	low <4	High <15-40	>20-40 cmol kg-1
217	Clay loam	pH 7,2-8,5	low <4	Very high >40	>10-20 cmol kg-1
218	Clay loam	pH	low <4	Very high >40	>20-40

		7,2-8,5			cmol kg-1
219	Clay loam	pH 7,2-8,5	moderate 4-9	None to very low <2	>20-40 cmol kg-1
220	Clay loam	pH 7,2-8,5	moderate 4-9	Low 2 to <5	>10-20 cmol kg-1
221	Clay loam	pH 7,2-8,5	moderate 4-9	Low 2 to <5	>20-40 cmol kg-1
222	Clay loam	pH 7,2-8,5	high>9 et <15	High <15-40	>20-40 cmol kg-1
223	Clay loam	pH > 8,5	low <4	Low 2 to <5	>10-20 cmol kg-1
224	Clay loam	pH > 8,5	low <4	Low 2 to <5	>20-40 cmol kg-1
225	Clay loam	pH > 8,5	low <4	High <15-40	>10-20 cmol kg-1
226	Clay loam	pH > 8,5	low <4	High <15-40	>20-40 cmol kg-1
227	Silt	pH 4,5-5,5	low <4	None to very low <2	< 4 cmol kg-1
228	Silt loam	pH inf 4,5	low <4	None to very low <2	< 4 cmol kg-1
229	Silt loam	pH inf 4,5	low <4	None to very low <2	4-10 cmol kg -1
230	Silt loam	pH inf 4,5	low <4	None to very low <2	>10-20 cmol kg-1
231	Silt loam	pH inf 4,5	moderate 4-9	None to very low <2	>10-20 cmol kg-1
232	Silt loam	pH inf 4,5	peat soils >30	None to very low <2	>20-40 cmol kg-1
233	Silt loam	pH 4,5-5,5	low <4	None to very low <2	< 4 cmol kg-1
234	Silt loam	pH 4,5-5,5	low <4	None to very low <2	4-10 cmol kg -1
235	Silt loam	pH 4,5-5,5	low <4	None to very low <2	>10-20 cmol kg-1
236	Silt loam	pH 4,5-5,5	low <4	None to very low <2	>20-40 cmol kg-1
237	Silt loam	pH 4,5-5,5	moderate 4-9	None to very low <2	4-10 cmol kg -1
238	Silt loam	pH 4,5-5,5	moderate 4-9	None to very low <2	>10-20 cmol kg-1
239	Silt loam	pH 4,5-5,5	moderate 4-9	None to very low <2	>20-40 cmol kg-1

240	Silt loam	pH 4,5-5,5	moderate 4-9	None to very low <2	>40 cmol kg-1
241	Silt loam	pH 4,5-5,5	high>9 et <15	None to very low <2	>10-20 cmol kg-1
242	Silt loam	pH 4,5-5,5	high>9 et <15	None to very low <2	>40 cmol kg-1
243	Silt loam	pH 4,5-5,5	peat soils >30	None to very low <2	>40 cmol kg-1
244	Silt loam	pH 5,5-7,2	low <4	None to very low <2	< 4 cmol kg-1
245	Silt loam	pH 5,5-7,2	low <4	None to very low <2	4-10 cmol kg -1
246	Silt loam	pH 5,5-7,2	low <4	None to very low <2	>10-20 cmol kg-1
247	Silt loam	pH 5,5-7,2	low <4	None to very low <2	>20-40 cmol kg-1
248	Silt loam	pH 5,5-7,2	low <4	None to very low <2	>40 cmol kg-1
249	Silt loam	pH 5,5-7,2	low <4	Low 2 to <5	>10-20 cmol kg-1
250	Silt loam	pH 5,5-7,2	low <4	Moderate 5 to 15	>10-20 cmol kg-1
251	Silt loam	pH 5,5-7,2	moderate 4-9	None to very low <2	>10-20 cmol kg-1
252	Silt loam	pH 5,5-7,2	moderate 4-9	None to very low <2	>20-40 cmol kg-1
253	Silt loam	pH 5,5-7,2	moderate 4-9	Moderate 5 to 15	>20-40 cmol kg-1
254	Silt loam	pH 5,5-7,2	high>9 et <15	None to very low <2	>40 cmol kg-1
255	Silt loam	pH 5,5-7,2	humus- bearing 15-30	None to very low <2	>40 cmol kg-1
256	Silt loam	pH 7,2-8,5	low <4	None to very low <2	>10-20 cmol kg-1
257	Silt loam	pH 7,2-8,5	low <4	Low 2 to <5	4-10 cmol kg -1
258	Silt loam	pH 7,2-8,5	low <4	Low 2 to <5	>10-20 cmol kg-1
259	Silt loam	pH 7,2-8,5	low <4	Low 2 to <5	>20-40 cmol kg-1
260	Silt loam	pH 7,2-8,5	low <4	Moderate 5 to 15	>10-20 cmol kg-1
261	Silt loam	pH	low <4	Moderate 5	>20-40

		7,2-8,5		to 15	cmol kg-1
262	Silt loam	pH > 8,5	low <4	Low 2 to <5	4-10 cmol kg -1
263	Silt loam	pH > 8,5	low <4	Low 2 to <5	>20-40 cmol kg-1
264	Sandy clay	pH inf 4,5	low <4	None to very low <2	< 4 cmol kg-1
265	Sandy clay	pH inf 4,5	low <4	None to very low <2	4-10 cmol kg -1
266	Sandy clay	pH inf 4,5	low <4	None to very low <2	>20-40 cmol kg-1
267	Sandy clay	pH inf 4,5	moderate 4-9	None to very low <2	>10-20 cmol kg-1
268	Sandy clay	pH 4,5-5,5	low <4	None to very low <2	< 4 cmol kg-1
269	Sandy clay	pH 4,5-5,5	low <4	None to very low <2	4-10 cmol kg -1
270	Sandy clay	pH 4,5-5,5	low <4	None to very low <2	>10-20 cmol kg-1
271	Sandy clay	pH 4,5-5,5	moderate 4-9	None to very low <2	>10-20 cmol kg-1
272	Sandy clay	pH 4,5-5,5	high>9 et <15	None to very low <2	>10-20 cmol kg-1
273	Sandy clay	pH 5,5-7,2	low <4	None to very low <2	< 4 cmol kg-1
274	Sandy clay	pH 5,5-7,2	low <4	None to very low <2	4-10 cmol kg -1
275	Sandy clay	pH 5,5-7,2	low <4	None to very low <2	>10-20 cmol kg-1
276	Sandy clay	pH 5,5-7,2	low <4	None to very low <2	>20-40 cmol kg-1
277	Sandy clay	pH 5,5-7,2	low <4	Moderate 5 to 15	>10-20 cmol kg-1
278	Sandy clay	pH 5,5-7,2	moderate 4-9	None to very low <2	>20-40 cmol kg-1
279	Sandy clay	pH 7,2-8,5	low <4	None to very low <2	>20-40 cmol kg-1
281	Sandy clay	pH 7,2-8,5	low <4	Low 2 to <5	>10-20 cmol kg-1
282	Sandy clay	pH 7,2-8,5	low <4	Low 2 to <5	>20-40 cmol kg-1
284	Sandy clay	pH 7,2-8,5	low <4	High <15-40	>10-20 cmol kg-1

285	Sandy clay	pH 7,2-8,5	low <4	High <15-40	>20-40 cmol kg-1
286	Sandy clay	pH 7,2-8,5	moderate 4-9	Low 2 to <5	>20-40 cmol kg-1
288	Sandy clay	pH > 8,5	low <4	High <15-40	>20-40 cmol kg-1
289	Loam	pH inf 4,5	low <4	None to very low <2	4-10 cmol kg -1
290	Loam	pH inf 4,5	low <4	None to very low <2	>10-20 cmol kg-1
291	Loam	pH inf 4,5	moderate 4-9	None to very low <2	4-10 cmol kg -1
292	Loam	pH inf 4,5	moderate 4-9	None to very low <2	>10-20 cmol kg-1
293	Loam	pH inf 4,5	moderate 4-9	None to very low <2	>20-40 cmol kg-1
294	Loam	pH inf 4,5	humus- bearing 15-30	None to very low <2	>10-20 cmol kg-1
295	Loam	pH inf 4,5	humus- bearing 15-30	None to very low <2	>40 cmol kg-1
296	Loam	pH inf 4,5	peat soils >30	None to very low <2	>40 cmol kg-1
297	Loam	pH 4,5-5,5	low <4	None to very low <2	< 4 cmol kg-1
298	Loam	pH 4,5-5,5	low <4	None to very low <2	4-10 cmol kg -1
299	Loam	pH 4,5-5,5	low <4	None to very low <2	>10-20 cmol kg-1
300	Loam	pH 4,5-5,5	low <4	None to very low <2	>20-40 cmol kg-1
301	Loam	pH 4,5-5,5	low <4	None to very low <2	>40 cmol kg-1
302	Loam	pH 4,5-5,5	moderate 4-9	None to very low <2	>10-20 cmol kg-1
303	Loam	pH 4,5-5,5	moderate 4-9	None to very low <2	>20-40 cmol kg-1
304	Loam	pH 4,5-5,5	moderate 4-9	None to very low <2	>40 cmol kg-1
305	Loam	pH 4,5-5,5	high>9 et <15	None to very low <2	>10-20 cmol kg-1
306	Loam	pH 4,5-5,5	high>9 et <15	None to very low <2	>20-40 cmol kg-1
307	Loam	pH	humus-	None to very	4-10 cmol

		4,5-5,5	bearing 15-30	low <2	kg -1
308	Loam	pH 4,5-5,5	peat soils >30	None to very low <2	>40 cmol kg-1
309	Loam	pH 5,5-7,2	low <4	None to very low <2	4-10 cmol kg -1
310	Loam	pH 5,5-7,2	low <4	None to very low <2	>10-20 cmol kg-1
311	Loam	pH 5,5-7,2	low <4	None to very low <2	>20-40 cmol kg-1
312	Loam	pH 5,5-7,2	low <4	None to very low <2	>40 cmol kg-1
313	Loam	pH 5,5-7,2	low <4	Low 2 to <5	>10-20 cmol kg-1
314	Loam	pH 5,5-7,2	low <4	Low 2 to <5	>20-40 cmol kg-1
315	Loam	pH 5,5-7,2	low <4	Moderate 5 to 15	4-10 cmol kg -1
316	Loam	pH 5,5-7,2	low <4	Moderate 5 to 15	>10-20 cmol kg-1
317	Loam	pH 5,5-7,2	low <4	Moderate 5 to 15	>20-40 cmol kg-1
318	Loam	pH 5,5-7,2	moderate 4-9	None to very low <2	< 4 cmol kg-1
319	Loam	pH 5,5-7,2	moderate 4-9	None to very low <2	>10-20 cmol kg-1
320	Loam	pH 5,5-7,2	moderate 4-9	None to very low <2	>20-40 cmol kg-1
321	Loam	pH 5,5-7,2	moderate 4-9	Moderate 5 to 15	>20-40 cmol kg-1
322	Loam	pH 5,5-7,2	high>9 et <15	None to very low <2	>20-40 cmol kg-1
323	Loam	pH 5,5-7,2	high>9 et <15	None to very low <2	>40 cmol kg-1
324	Loam	pH 5,5-7,2	peat soils >30	None to very low <2	>20-40 cmol kg-1
325	Loam	pH 7,2-8,5	low <4	None to very low <2	4-10 cmol kg -1
326	Loam	pH 7,2-8,5	low <4	None to very low <2	>10-20 cmol kg-1
327	Loam	pH 7,2-8,5	low <4	None to very low <2	>20-40 cmol kg-1
328	Loam	pH 7,2-8,5	low <4	Low 2 to <5	4-10 cmol kg -1

329	Loam	pH 7,2-8,5	low <4	Low 2 to <5	>10-20 cmol kg-1
330	Loam	pH 7,2-8,5	low <4	Low 2 to <5	>20-40 cmol kg-1
331	Loam	pH 7,2-8,5	low <4	Moderate 5 to 15	>10-20 cmol kg-1
332	Loam	pH 7,2-8,5	low <4	Moderate 5 to 15	>20-40 cmol kg-1
333	Loam	pH 7,2-8,5	low <4	High <15-40	4-10 cmol kg -1
334	Loam	pH 7,2-8,5	low <4	High <15-40	>10-20 cmol kg-1
335	Loam	pH 7,2-8,5	low <4	High <15-40	>20-40 cmol kg-1
336	Loam	pH 7,2-8,5	low <4	High <15-40	>40 cmol kg-1
337	Loam	pH 7,2-8,5	low <4	Very high >40	>10-20 cmol kg-1
338	Loam	pH 7,2-8,5	low <4	Very high >40	>20-40 cmol kg-1
339	Loam	pH 7,2-8,5	moderate 4-9	None to very low <2	>10-20 cmol kg-1
340	Loam	pH 7,2-8,5	moderate 4-9	None to very low <2	>20-40 cmol kg-1
341	Loam	pH 7,2-8,5	moderate 4-9	Low 2 to <5	>10-20 cmol kg-1
342	Loam	pH 7,2-8,5	moderate 4-9	Low 2 to <5	>20-40 cmol kg-1
343	Loam	pH 7,2-8,5	moderate 4-9	Moderate 5 to 15	>20-40 cmol kg-1
344	Loam	pH 7,2-8,5	moderate 4-9	High <15-40	>20-40 cmol kg-1
345	Loam	pH 7,2-8,5	high>9 et <15	High <15-40	>10-20 cmol kg-1
346	Loam	pH > 8,5	low <4	Low 2 to <5	>10-20 cmol kg-1
347	Loam	pH > 8,5	low <4	Moderate 5 to 15	>10-20 cmol kg-1
348	Loam	pH > 8,5	low <4	Moderate 5 to 15	>20-40 cmol kg-1
349	Loam	pH > 8,5	low <4	Moderate 5 to 15	>40 cmol kg-1
350	Loam	pH >	low <4	High <15-40	>10-20

		8,5			cmol kg-1
351	Loam	pH > 8,5	high >9 et <15	Moderate 5 to 15	>20-40 cmol kg-1
352	Sandy loam clay	pH inf 4,5	low <4	None to very low <2	< 4 cmol kg-1
353	Sandy loam clay	pH inf 4,5	low <4	None to very low <2	4-10 cmol kg-1
354	Sandy loam clay	pH inf 4,5	low <4	None to very low <2	>10-20 cmol kg-1
355	Sandy loam clay	pH inf 4,5	moderate 4-9	None to very low <2	4-10 cmol kg-1
356	Sandy loam clay	pH inf 4,5	moderate 4-9	None to very low <2	>10-20 cmol kg-1
357	Sandy loam clay	pH inf 4,5	moderate 4-9	None to very low <2	>20-40 cmol kg-1
358	Sandy loam clay	pH 4,5-5,5	low <4	None to very low <2	< 4 cmol kg-1
359	Sandy loam clay	pH 4,5-5,5	low <4	None to very low <2	4-10 cmol kg-1
360	Sandy loam clay	pH 4,5-5,5	low <4	None to very low <2	>10-20 cmol kg-1
361	Sandy loam clay	pH 4,5-5,5	low <4	None to very low <2	>20-40 cmol kg-1
362	Sandy loam clay	pH 4,5-5,5	low <4	None to very low <2	>40 cmol kg-1
363	Sandy loam clay	pH 4,5-5,5	moderate 4-9	None to very low <2	4-10 cmol kg-1
364	Sandy loam clay	pH 4,5-5,5	moderate 4-9	None to very low <2	>10-20 cmol kg-1
365	Sandy loam clay	pH 4,5-5,5	high >9 et <15	None to very low <2	>20-40 cmol kg-1
366	Sandy loam clay	pH 5,5-7,2	low <4	None to very low <2	< 4 cmol kg-1
367	Sandy loam clay	pH 5,5-7,2	low <4	None to very low <2	4-10 cmol kg-1
368	Sandy loam clay	pH 5,5-7,2	low <4	None to very low <2	>10-20 cmol kg-1
369	Sandy loam clay	pH 5,5-7,2	low <4	None to very low <2	>20-40 cmol kg-1
370	Sandy loam clay	pH 5,5-7,2	low <4	Low 2 to <5	4-10 cmol kg-1
371	Sandy loam clay	pH 5,5-7,2	low <4	Low 2 to <5	>10-20 cmol kg-1



372	Sandy loam	clay	pH 5,5-7,2	low <4	Low 2 to <5	>20-40 cmol kg-1
373	Sandy loam	clay	pH 5,5-7,2	low <4	Moderate 5 to 15	>10-20 cmol kg-1
374	Sandy loam	clay	pH 5,5-7,2	low <4	Very high >40	>10-20 cmol kg-1
375	Sandy loam	clay	pH 5,5-7,2	moderate 4-9	None to very low <2	>10-20 cmol kg-1
376	Sandy loam	clay	pH 5,5-7,2	moderate 4-9	None to very low <2	>20-40 cmol kg-1
377	Sandy loam	clay	pH 5,5-7,2	moderate 4-9	Low 2 to <5	>20-40 cmol kg-1
378	Sandy loam	clay	pH 7,2-8,5	low <4	None to very low <2	4-10 cmol kg -1
379	Sandy loam	clay	pH 7,2-8,5	low <4	None to very low <2	>10-20 cmol kg-1
380	Sandy loam	clay	pH 7,2-8,5	low <4	Low 2 to <5	4-10 cmol kg -1
381	Sandy loam	clay	pH 7,2-8,5	low <4	Low 2 to <5	>10-20 cmol kg-1
382	Sandy loam	clay	pH 7,2-8,5	low <4	Low 2 to <5	>20-40 cmol kg-1
383	Sandy loam	clay	pH 7,2-8,5	low <4	Moderate 5 to 15	4-10 cmol kg -1
383a	Sandy loam	clay	pH 7,2-8,5	low <4	Moderate 5 to 15	< 4 cmol kg-1
384	Sandy loam	clay	pH 7,2-8,5	low <4	Moderate 5 to 15	>10-20 cmol kg-1
385	Sandy loam	clay	pH 7,2-8,5	low <4	Moderate 5 to 15	>20-40 cmol kg-1
386	Sandy loam	clay	pH 7,2-8,5	low <4	High <15-40	4-10 cmol kg -1
387	Sandy loam	clay	pH 7,2-8,5	low <4	High <15-40	>10-20 cmol kg-1
387a	Sandy loam	clay	pH 7,2-8,5	humus-bearing 15-30	Low 2 to <5	>40 cmol kg-1
388	Sandy loam	clay	pH 7,2-8,5	low <4	High <15-40	>20-40 cmol kg-1
389	Sandy loam	clay	pH 7,2-8,5	low <4	Very high >40	>10-20 cmol kg-1
390	Sandy loam	clay	pH 7,2-8,5	moderate 4-9	None to very low <2	>20-40 cmol kg-1
391	Sandy loam	clay	pH	moderate 4-9	Low 2 to <5	>20-40

	loam	7,2-8,5			cmol kg-1
392	Sandy clay loam	pH 7,2-8,5	moderate 4-9	Very high >40	>20-40 cmol kg-1
393	Sandy clay loam	pH > 8,5	low <4	Low 2 to <5	>10-20 cmol kg-1
394	Sandy clay loam	pH > 8,5	low <4	Low 2 to <5	>20-40 cmol kg-1
395	Sandy clay loam	pH > 8,5	low <4	Moderate 5 to 15	4-10 cmol kg -1
396	Sandy clay loam	pH > 8,5	low <4	Moderate 5 to 15	>20-40 cmol kg-1
397	Sandy loam	pH inf 4,5	low <4	None to very low <2	< 4 cmol kg-1
398	Sandy loam	pH inf 4,5	low <4	None to very low <2	4-10 cmol kg -1
399	Sandy loam	pH inf 4,5	low <4	None to very low <2	>10-20 cmol kg-1
400	Sandy loam	pH inf 4,5	low <4	None to very low <2	>20-40 cmol kg-1
401	Sandy loam	pH inf 4,5	moderate 4-9	None to very low <2	>10-20 cmol kg-1
402	Sandy loam	pH inf 4,5	moderate 4-9	None to very low <2	>20-40 cmol kg-1
403	Sandy loam	pH inf 4,5	high>9 et <15	None to very low <2	>20-40 cmol kg-1
404	Sandy loam	pH inf 4,5	humus-bearing 15-30	None to very low <2	>40 cmol kg-1
405	Sandy loam	pH 4,5-5,5	low <4	None to very low <2	< 4 cmol kg-1
406	Sandy loam	pH 4,5-5,5	low <4	None to very low <2	4-10 cmol kg -1
407	Sandy loam	pH 4,5-5,5	low <4	None to very low <2	>10-20 cmol kg-1
408	Sandy loam	pH 4,5-5,5	low <4	None to very low <2	>20-40 cmol kg-1
409	Sandy loam	pH 4,5-5,5	moderate 4-9	None to very low <2	4-10 cmol kg -1
410	Sandy loam	pH 4,5-5,5	moderate 4-9	None to very low <2	>10-20 cmol kg-1
411	Sandy loam	pH 4,5-5,5	moderate 4-9	None to very low <2	>20-40 cmol kg-1
412	Sandy loam	pH 4,5-5,5	high>9 et <15	None to very low <2	>10-20 cmol kg-1

413	Sandy loam	pH 4,5-5,5	high>9 et <15	None to very low <2	>20-40 cmol kg-1
414	Sandy loam	pH 4,5-5,5	humus- bearing 15-30	None to very low <2	>40 cmol kg-1
415	Sandy loam	pH 5,5-7,2	low <4	None to very low <2	< 4 cmol kg-1
416	Sandy loam	pH 5,5-7,2	low <4	None to very low <2	4-10 cmol kg -1
417	Sandy loam	pH 5,5-7,2	low <4	None to very low <2	>10-20 cmol kg-1
418	Sandy loam	pH 5,5-7,2	low <4	None to very low <2	>20-40 cmol kg-1
419	Sandy loam	pH 5,5-7,2	low <4	None to very low <2	>40 cmol kg-1
420	Sandy loam	pH 5,5-7,2	low <4	Low 2 to <5	< 4 cmol kg-1
421	Sandy loam	pH 5,5-7,2	low <4	Low 2 to <5	4-10 cmol kg -1
422	Sandy loam	pH 5,5-7,2	low <4	Low 2 to <5	>10-20 cmol kg-1
423	Sandy loam	pH 5,5-7,2	low <4	Moderate 5 to 15	4-10 cmol kg -1
424	Sandy loam	pH 5,5-7,2	low <4	Moderate 5 to 15	>10-20 cmol kg-1
425	Sandy loam	pH 5,5-7,2	moderate 4-9	None to very low <2	4-10 cmol kg -1
426	Sandy loam	pH 5,5-7,2	moderate 4-9	None to very low <2	>10-20 cmol kg-1
427	Sandy loam	pH 5,5-7,2	moderate 4-9	None to very low <2	>20-40 cmol kg-1
428	Sandy loam	pH 5,5-7,2	high>9 et <15	None to very low <2	>10-20 cmol kg-1
429	Sandy loam	pH 5,5-7,2	high>9 et <15	None to very low <2	>20-40 cmol kg-1
430	Sandy loam	pH 7,2-8,5	low <4	None to very low <2	4-10 cmol kg -1
431	Sandy loam	pH 7,2-8,5	low <4	None to very low <2	>10-20 cmol kg-1
432	Sandy loam	pH 7,2-8,5	low <4	Low 2 to <5	< 4 cmol kg-1
433	Sandy loam	pH 7,2-8,5	low <4	Low 2 to <5	4-10 cmol kg -1
434	Sandy loam	pH	low <4	Low 2 to <5	>10-20

		7,2-8,5			cmol kg-1
435	Sandy loam	pH 7,2-8,5	low <4	Low 2 to <5	>20-40 cmol kg-1
436	Sandy loam	pH 7,2-8,5	low <4	Moderate 5 to 15	4-10 cmol kg -1
437	Sandy loam	pH 7,2-8,5	low <4	Moderate 5 to 15	>10-20 cmol kg-1
438	Sandy loam	pH 7,2-8,5	low <4	Moderate 5 to 15	>20-40 cmol kg-1
439	Sandy loam	pH 7,2-8,5	low <4	Moderate 5 to 15	>40 cmol kg-1
440	Sandy loam	pH 7,2-8,5	low <4	High <15-40	4-10 cmol kg -1
441	Sandy loam	pH 7,2-8,5	low <4	High <15-40	>10-20 cmol kg-1
442	Sandy loam	pH 7,2-8,5	low <4	High <15-40	>20-40 cmol kg-1
443	Sandy loam	pH 7,2-8,5	moderate 4-9	High <15-40	>10-20 cmol kg-1
444	Sandy loam	pH > 8,5	low <4	Low 2 to <5	4-10 cmol kg -1
445	Sandy loam	pH > 8,5	low <4	Low 2 to <5	>10-20 cmol kg-1
446	Sandy loam	pH > 8,5	low <4	Moderate 5 to 15	4-10 cmol kg -1
447	Sandy loam	pH > 8,5	low <4	Moderate 5 to 15	>10-20 cmol kg-1
448	Sandy loam	pH > 8,5	low <4	Very high >40	4-10 cmol kg -1
449	Loamy sand	pH inf 4,5	low <4	None to very low <2	< 4 cmol kg-1
450	Loamy sand	pH inf 4,5	low <4	None to very low <2	4-10 cmol kg -1
451	Loamy sand	pH inf 4,5	moderate 4-9	None to very low <2	>10-20 cmol kg-1
452	Loamy sand	pH 4,5-5,5	low <4	None to very low <2	< 4 cmol kg-1
453	Loamy sand	pH 4,5-5,5	low <4	None to very low <2	4-10 cmol kg -1
454	Loamy sand	pH 4,5-5,5	low <4	None to very low <2	>10-20 cmol kg-1
455	Loamy sand	pH 4,5-5,5	moderate 4-9	None to very low <2	4-10 cmol kg -1

456	Loamy sand	pH 4,5-5,5	moderate 4-9	None to very low <2	>10-20 cmol kg-1
457	Loamy sand	pH 4,5-5,5	moderate 4-9	None to very low <2	>20-40 cmol kg-1
458	Loamy sand	pH 4,5-5,5	humus- bearing 15-30	None to very low <2	>10-20 cmol kg-1
459	Loamy sand	pH 4,5-5,5	humus- bearing 15-30	None to very low <2	>20-40 cmol kg-1
460	Loamy sand	pH 5,5-7,2	low <4	None to very low <2	< 4 cmol kg-1
461	Loamy sand	pH 5,5-7,2	low <4	None to very low <2	4-10 cmol kg -1
462	Loamy sand	pH 5,5-7,2	low <4	None to very low <2	>10-20 cmol kg-1
463	Loamy sand	pH 5,5-7,2	low <4	Low 2 to <5	< 4 cmol kg-1
464	Loamy sand	pH 5,5-7,2	low <4	Low 2 to <5	4-10 cmol kg -1
465	Loamy sand	pH 5,5-7,2	low <4	Low 2 to <5	>10-20 cmol kg-1
466	Loamy sand	pH 5,5-7,2	low <4	Moderate 5 to 15	4-10 cmol kg -1
467	Loamy sand	pH 5,5-7,2	moderate 4-9	None to very low <2	>10-20 cmol kg-1
468	Loamy sand	pH 7,2-8,5	low <4	None to very low <2	4-10 cmol kg -1
469	Loamy sand	pH 7,2-8,5	low <4	None to very low <2	>10-20 cmol kg-1
470	Loamy sand	pH 7,2-8,5	low <4	Low 2 to <5	< 4 cmol kg-1
471	Loamy sand	pH 7,2-8,5	low <4	Low 2 to <5	4-10 cmol kg -1
472	Loamy sand	pH 7,2-8,5	low <4	Low 2 to <5	>10-20 cmol kg-1
473	Loamy sand	pH 7,2-8,5	low <4	Low 2 to <5	>20-40 cmol kg-1
474	Loamy sand	pH 7,2-8,5	low <4	Moderate 5 to 15	< 4 cmol kg-1
475	Loamy sand	pH 7,2-8,5	low <4	Moderate 5 to 15	4-10 cmol kg -1
476	Loamy sand	pH 7,2-8,5	low <4	Moderate 5 to 15	>10-20 cmol kg-1
477	Loamy sand	pH	low <4	High <15-40	< 4 cmol

		7,2-8,5			kg-1
478	Loamy sand	pH 7,2-8,5	low <4	High <15-40	4-10 cmol kg -1
479	Loamy sand	pH 7,2-8,5	low <4	High <15-40	>10-20 cmol kg-1
480	Loamy sand	pH 7,2-8,5	moderate 4-9	Low 2 to <5	>10-20 cmol kg-1
481	Loamy sand	pH > 8,5	low <4	Low 2 to <5	< 4 cmol kg-1
482	Loamy sand	pH > 8,5	low <4	Low 2 to <5	4-10 cmol kg -1
483	Loamy sand	pH > 8,5	low <4	Moderate 5 to 15	< 4 cmol kg-1
484	Loamy sand	pH > 8,5	low <4	Moderate 5 to 15	4-10 cmol kg -1
485	Loamy sand	pH > 8,5	low <4	High <15-40	4-10 cmol kg -1
486	Loamy sand	pH > 8,5	low <4	Very high >40	4-10 cmol kg -1
487	Sand	pH inf 4,5	low <4	None to very low <2	< 4 cmol kg-1
488	Sand	pH inf 4,5	low <4	None to very low <2	4-10 cmol kg -1
489	Sand	pH inf 4,5	moderate 4-9	None to very low <2	< 4 cmol kg-1
490	Sand	pH inf 4,5	moderate 4-9	None to very low <2	4-10 cmol kg -1
491	Sand	pH 4,5-5,5	low <4	None to very low <2	< 4 cmol kg-1
492	Sand	pH 4,5-5,5	low <4	None to very low <2	4-10 cmol kg -1
493	Sand	pH 4,5-5,5	moderate 4-9	None to very low <2	4-10 cmol kg -1
494	Sand	pH 5,5-7,2	low <4	None to very low <2	< 4 cmol kg-1
495	Sand	pH 5,5-7,2	low <4	None to very low <2	4-10 cmol kg -1
496	Sand	pH 5,5-7,2	low <4	Low 2 to <5	< 4 cmol kg-1
497	Sand	pH 5,5-7,2	low <4	Moderate 5 to 15	4-10 cmol kg -1
498	Sand	pH 5,5-7,2	moderate 4-9	None to very low <2	< 4 cmol kg-1

499	Sand	pH 7,2-8,5	low <4	None to very low <2	< 4 cmol kg-1
500	Sand	pH 7,2-8,5	low <4	Low 2 to <5	< 4 cmol kg-1
501	Sand	pH 7,2-8,5	low <4	Low 2 to <5	4-10 cmol kg -1
502	Sand	pH 7,2-8,5	low <4	Moderate 5 to 15	< 4 cmol kg-1
503	Sand	pH 7,2-8,5	low <4	Moderate 5 to 15	4-10 cmol kg -1
504	Sand	pH 7,2-8,5	low <4	Moderate 5 to 15	>20-40 cmol kg-1
505	Sand	pH > 8,5	low <4	Low 2 to <5	< 4 cmol kg-1
506	Sand	pH > 8,5	low <4	Low 2 to <5	4-10 cmol kg -1
507	Sand	pH > 8,5	low <4	Moderate 5 to 15	< 4 cmol kg-1
508	Sand	pH > 8,5	low <4	Moderate 5 to 15	>10-20 cmol kg-1
509	Sand	pH > 8,5	low <4	High <15-40	< 4 cmol kg-1
510	Humus-bearing 15 - 30	pH inf 4,5	high>9 et <15	None to very low <2	>20-40 cmol kg-1
511	Humus-bearing 15 - 30	pH inf 4,5	humus- bearing 15-30	None to very low <2	>20-40 cmol kg-1
512	Humus-bearing 15 - 30	pH inf 4,5	humus- bearing 15-30	None to very low <2	>40 cmol kg-1
513	Humus-bearing 15 - 30	pH 4,5-5,5	high>9 et <15	None to very low <2	>10-20 cmol kg-1
514	Humus-bearing 15 - 30	pH 4,5-5,5	humus- bearing 15-30	None to very low <2	>40 cmol kg-1
515	Humus-bearing 15 - 30	pH 5,5-7,2	high>9 et <15	None to very low <2	>40 cmol kg-1
516	Peat soils	pH inf 4,5	peat soils >30	None to very low <2	>40 cmol kg-1
517	Peat soils	pH 4,5-5,5	peat soils >30	None to very low <2	>20-40 cmol kg-1
518	Peat soils	pH 4,5-5,5	peat soils >30	None to very low <2	>40 cmol kg-1
519	Peat soils	pH 5,5-7,2	peat soils >30	None to very low <2	>40 cmol kg-1

### B.5. Spread of CF values for the 518 soil archetypes resolution

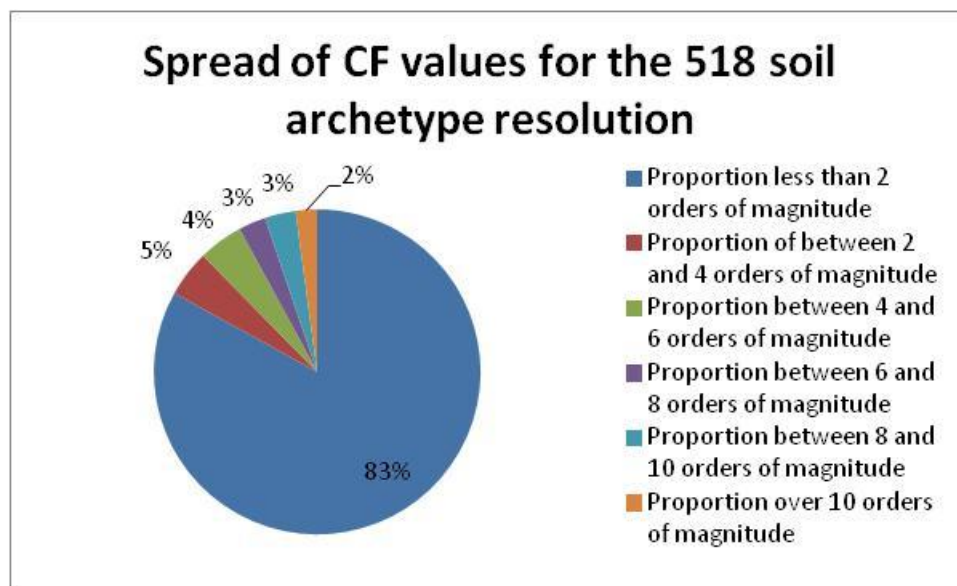


Figure B.10 Spread of CF values for the 518 soil archetypes resolution

### B.6. Spread of CF values for the 518 archetypes resolution with a 95% confidence interval

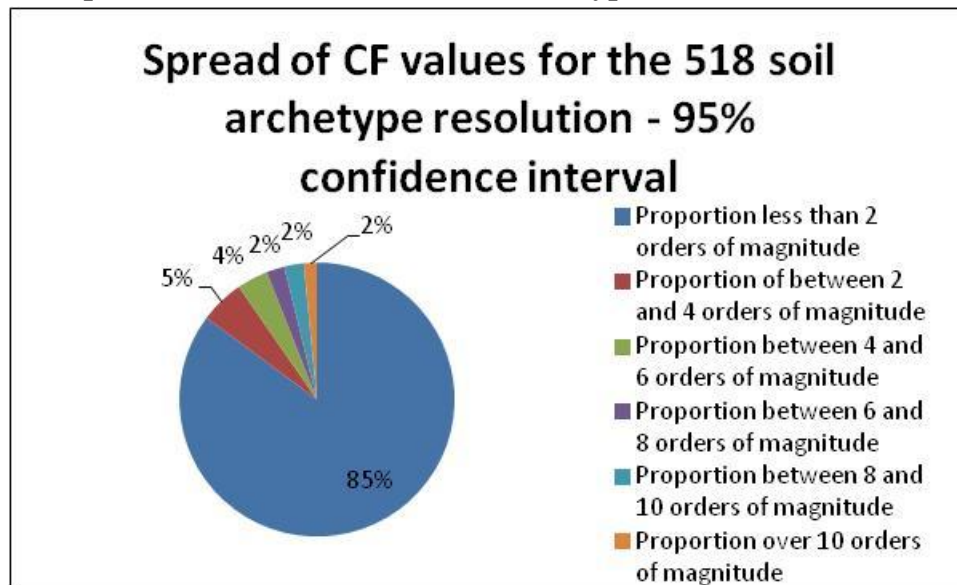


Figure B.11 Spread of CF values for the 518 soil archetypes resolution with a 95% confidence interval

### B.7. Median, minimum, maximum and spread values for the 518 archetypes using soluble Zn



Tableau B.19 CF results (log CF) for soluble Zn for the 518 archetypes

Archetype	Minimum	Maximum	Median	Spread
1	0,67387531	0,6834378	0,71558827	0,12320898
2	0,62692398	0,62692398	0,62692398	0
3	0,68391678	0,68391678	0,68391678	0
4	0,71223819	0,71045948	0,72144081	0,01484782
5	0,66006781	0,70164593	0,73112945	0,18370139
6	0,70498526	0,70498526	0,70498526	0
7	0,58756816	0,58756816	0,58756816	0
8	0,69080098	0,69937545	0,72030897	0,08603089
9	0,70874401	0,70934785	0,74828721	0,08817242
10	0,63754971	0,68190365	0,77446955	0,68629712
11	0,66461651	0,71574809	0,74830666	0,21851188
12	0,70002974	0,703252	0,73101179	0,06031496
13	0,73121161	0,73675594	0,75543302	0,06309072
14	0,67293221	0,67293221	0,71274465	0,07962488
15	0,7044096	0,69834205	0,75191594	0,06938217
16	0,66691267	0,66691267	0,66691267	0
17	0,71527598	0,71527598	0,74742339	0,06429481
18	0,73108874	0,73839408	0,75690153	0,08323883
19	0,75707742	0,75609391	0,77967526	0,05700382
20	0,76112285	0,77059461	0,79414379	0,24702365
21	0,75087474	0,75087474	0,75087474	0
22	0,76563031	0,76563031	0,7656799	9,9194E-05
23	0,73944887	0,73944887	0,773551	0,06820428
24	0,70589572	0,70589572	0,70589572	0
25	0,74458921	0,75984849	0,76934157	0,07113715
26	0,76370139	0,7633034	0,7669421	0,00568544
27	0,76681622	0,76681622	0,7793026	0,02497275
28	0,76397252	0,76397252	0,76554786	0,00315067

29	0,76186057	0,76221584	0,76423774	0,00510961
30	0,76921352	0,76671266	0,77947318	0,01801846
31	0,77037218	0,77413307	0,78114906	0,02171512
32	0,77554418	0,77408636	0,79418964	0,03241146
33	0,76755229	0,76755229	0,77155663	0,00800868
34	0,76593026	0,76593026	0,76593026	0
35	0,76413663	0,76413663	0,7732928	0,01831234
36	0,77782135	0,77782135	0,78258986	0,00953701
37	0,73479315	0,73479315	0,73479315	0
38	0,77431373	0,77431373	0,77431373	0
39	0,75261563	0,75261563	0,75261563	0
40	0,36499125	0,36499125	0,75321863	0,77645474
41	-	-	-	0
42	-	-	-	0
43	0,52199588	0,52199588	0,55230872	0,06062568
44	0,68975116	0,68975116	0,69520677	0,01091121
45	0,58338912	0,58338912	0,58338912	0
46	0,64883587	0,64883587	0,64883587	0
47	0,65541562	0,64997776	0,70386623	0,08274302
48	0,68650241	0,70517235	0,73258049	0,11349784
49	0,66459582	0,6878943	0,71673537	0,13126192
50	0,66854517	0,66854517	0,66854517	0
51	0,69321949	0,70002619	0,72536804	0,07110382
52	0,72682319	0,73086034	0,74284674	0,03642863
53	0,7435003	0,74070429	0,76539786	0,03539615
54	0,75164784	0,75137467	0,7551871	0,00653216
55	0,73075991	0,74087149	0,74087149	0,02924304
56	0,75742218	0,75742218	0,76301561	0,01118686
57	0,7398192	0,7398192	0,7398192	0

58	0,73201892	0,73201892	0,74093712	0,0178364
59	0,76105166	0,76105166	0,76105166	0
60	0,74111519	0,74111519	0,74111519	0
61	0,74402786	0,74373034	0,7461105	0,00238017
62	0,76182299	0,76182299	0,76182299	0
63	0,74838228	0,74838228	0,74838228	0
64	0,75643299	0,75643299	0,75643299	0
65	0,74751745	0,74751745	0,74751745	0
66	0,75246943	0,75246943	0,75246943	0
67	0,75734329	0,75734329	0,75734329	0
68	0,26542887	0,26542887	0,30164952	0,07244129
69	0,58918198	0,58918198	0,58918198	0
70	0,62692732	0,63655137	0,63795635	0,03168211
71	0,63988369	0,64493789	0,68158098	0,1732231
72	0,57749276	0,5839169	0,65142283	0,14532697
73	0,6545266	0,6545266	0,66008922	0,01112524
74	0,67985109	0,68816504	0,72051517	0,09795606
75	0,49319225	0,49319225	0,49319225	0
76	0,6708689	0,6708689	0,6708689	0
77	0,64303818	0,64388139	0,64388139	0,00189721
78	0,6636882	0,67221215	0,70985482	0,11089348
79	0,6864599	0,69114749	0,72687208	0,12623353
80	0,66164914	0,66070356	0,72528774	0,25218624
81	0,60864346	0,60864346	0,60864346	0
82	0,62966076	0,62966076	0,62966076	0
83	0,65871735	0,65871735	0,65871735	0
84	0,68089278	0,67928853	0,71630104	0,05970124
85	0,70311073	0,700656	0,73625082	0,06752784
86	0,67290146	0,65329255	0,75019331	0,11536589
87	0,66091376	0,65771995	0,67278345	0,01919047

88	0,62445801	0,62445801	0,62451964	0,00012326
89	0,68091885	0,68148224	0,72530334	0,09244161
90	0,72135096	0,72206275	0,75454836	0,08436104
91	0,73642128	0,73816762	0,76281909	0,06807559
92	0,75064776	0,75791569	0,76317718	0,08620415
93	0,71944502	0,7215664	0,74287979	0,04899094
94	0,73479752	0,73479752	0,7460162	0,02243737
95	0,71558421	0,71558421	0,71558421	0
96	0,72656504	0,73092064	0,73799742	0,03157595
97	0,72701499	0,72701499	0,72701499	0
98	0,74287171	0,74287171	0,74287171	0
99	0,69022989	0,69022989	0,69715844	0,01385709
100	0,63888526	0,63888526	0,63888526	0
101	0,67217563	0,67497728	0,68816939	0,03086485
102	0,7206279	0,72787816	0,75362143	0,0807644
103	0,76404314	0,76757765	0,77184969	0,01914761
104	0,73810929	0,73810929	0,74019531	0,00417204
105	0,76357	0,76357	0,76357	0
106	0,69845406	0,69845406	0,69845406	0
107	0,6325314	0,6325314	0,6325314	0
108	0,6072431	0,6072431	0,6072431	0
109	0,74013236	0,73456715	0,75776079	0,02969165
110	0,74617362	0,74765189	0,75319092	0,02069486
111	0,76082093	0,76082093	0,76315216	0,00466245
112	0,73186953	0,73483781	0,73977849	0,02411203
113	0,74811749	0,74923611	0,76938801	0,03776079
114	0,75865378	0,76324882	0,77147077	0,03675075
115	0,74502783	0,74502783	0,75979539	0,02953512
116	0,75155401	0,75123649	0,76681286	0,03493885
117	0,75828969	0,75826501	0,7655828	0,01453685

118	0,75096432	0,75096432	0,75096432	0
119	0,75278176	0,75278176	0,76391773	0,02227195
120	0,67009783	0,67009783	0,67009783	0
121	0,69771771	0,69771771	0,73549169	0,07554796
122	0,67803745	0,67803745	0,67803745	0
123	0,72500796	0,72500796	0,72670372	0,00339152
124	0,7497786	0,74831508	0,75573842	0,01045613
125	0,75073274	0,75073274	0,75616569	0,01086589
126	0,75560973	0,75816081	0,76122493	0,01633258
127	0,67548009	0,67548009	0,74370248	0,13644478
128	0,74140721	0,74579263	0,75470882	0,0459997
129	0,72091446	0,72091446	0,72091446	0
130	0,64866602	0,76082906	0,76082906	0,88859315
131	0,75664598	0,75664598	0,75664598	0
132	0,4817224	0,75056855	0,75255577	0,81051289
133	0,60310314	0,60910593	0,62491446	0,0556282
134	0,57136516	0,56123933	0,65507388	0,14716578
135	0,54039987	0,57282824	0,57282824	0,09728511
136	0,62550727	0,62550727	0,62550727	0
137	0,66043844	0,66422507	0,67910067	0,04111108
138	0,5122313	0,5122313	0,5122313	0
139	0,60471166	0,60471166	0,60471166	0
140	0,64355959	0,64355959	0,64355959	0
141	0,6504328	0,65963902	0,68990011	0,07450307
142	0,64450602	0,65030618	0,69001827	0,10206154
143	0,62926901	0,62926901	0,65689844	0,05525885
144	0,60805638	0,60805638	0,60805638	0
145	0,67682583	0,67805609	0,70964658	0,06687177
146	0,65781901	0,65781901	0,70405649	0,09247496
147	0,63510045	0,63510045	0,63510045	0

148	0,65969438	0,65969438	0,65969438	0
149	0,70061958	0,70061958	0,70061958	0
150	0,71071356	0,71071356	0,72358612	0,02574513
151	0,70848209	0,70848209	0,72089981	0,02483543
152	0,73101776	0,7313153	0,73977025	0,01835186
153	0,74182604	0,74182604	0,74409561	0,00453913
154	0,71861111	0,71861111	0,71872732	0,00023241
155	0,69728041	0,69728041	0,69728041	0
156	0,71837287	0,7181852	0,72312886	0,00913662
157	0,73581623	0,73581623	0,73901977	0,00640709
158	0,63370403	0,63370403	0,63370403	0
159	0,62121443	0,62121443	0,62600096	0,00957305
160	0,72220023	0,72220023	0,72220023	0
161	0,74326798	0,74795106	0,74795106	0,01404925
162	0,73771586	0,73771586	0,73771586	0
163	0,66058086	0,66058086	0,66058086	0
164	0,73233655	0,73378305	0,74317619	0,02412243
165	0,72625379	0,719947	0,74058505	0,02235573
166	0,73963551	0,73963551	0,73963551	0
167	0,75153805	0,75153805	0,75153805	0
168	0,75641265	0,75641265	0,75641265	0
169	0,66189598	0,66189598	0,69143372	0,05907548
170	0,74001959	0,74001959	0,74001959	0
171	0,72977174	0,72977174	0,72977174	0
172	0,6192359	0,6192359	0,6192359	0
173	0,58321262	0,57896569	0,64490393	0,12445439
174	0,60252657	0,60506345	0,65166291	0,14485787
175	0,40875856	0,40875856	0,4701305	0,12274387
176	0,64846725	0,65721958	0,6803588	0,11004378
177	0,66989055	0,66989055	0,66989055	0

178	0,6947669	0,6947669	0,6947669	0
179	0,68393401	0,68393401	0,68393401	0
180	0,63364692	0,64488325	0,67932237	0,14467006
181	0,63955063	0,66043432	0,69883509	0,15845513
182	0,66926803	0,66953604	0,69477214	0,05154423
183	0,61848582	0,61848582	0,61848582	0
184	0,66723324	0,67624746	0,69795558	0,06647176
185	0,6834095	0,69215912	0,70212699	0,04759702
186	0,63747037	0,63747037	0,63747037	0
187	0,69535138	0,69535138	0,69535138	0
188	0,63962747	0,63962747	0,63962747	0
189	0,61365434	0,61365434	0,61365434	0
190	0,6691351	0,67966794	0,69821786	0,06676668
191	0,69800943	0,70160245	0,71903067	0,08998737
192	0,71048235	0,70953996	0,73305037	0,04578994
193	0,73059575	0,72995861	0,73659082	0,0145926
194	0,72181273	0,72181273	0,72375214	0,00387882
195	0,71220997	0,71361893	0,71750478	0,01550592
196	0,66749391	0,66749391	0,66749391	0
197	0,70209345	0,70209345	0,70882012	0,01345334
198	0,65429755	0,64311052	0,71162585	0,07546123
199	0,70882637	0,70882637	0,70882637	0
200	0,69416896	0,69416896	0,69416896	0
201	0,68066273	0,68066273	0,68066273	0
202	0,70762205	0,70689556	0,72433108	0,03200148
203	0,69039666	0,69039666	0,69823197	0,01567061
204	0,63129047	0,63129047	0,63129047	0
205	0,67051619	0,67051619	0,67051619	0
206	0,57154466	0,57154466	0,57154466	0
207	0,59552839	0,59552839	0,59552839	0

208	0,71624704	0,71601083	0,71795002	0,00293355
209	0,7296827	0,72850946	0,73400389	0,00852136
210	0,70519983	0,71877002	0,72169718	0,06013511
211	0,709805	0,71835792	0,73465025	0,10746372
212	0,72389821	0,72582257	0,73494354	0,0292732
213	0,72402163	0,72402163	0,73236206	0,01668086
214	0,72714541	0,72505175	0,73154139	0,00669829
215	0,72978589	0,72996647	0,73550749	0,01208409
216	0,73674516	0,73674516	0,74114938	0,00880843
217	0,66818567	0,66818567	0,66818567	0
218	0,72822065	0,72822065	0,72822065	0
219	0,70412226	0,70412226	0,70412226	0
220	0,6267327	0,6267327	0,6267327	0
221	0,71657944	0,71508508	0,72497981	0,01530638
222	0,62656696	0,62656696	0,62656696	0
223	0,58594558	0,58594558	0,58594558	0
224	0,56431112	0,68808221	0,73475594	0,67585179
225	- 0,10076966	- 0,13872878	- 0,00799585	- 0,14758848
226	- 0,07055946	- 0,06348733	- 0,01995022	- 0,19516362
227	0,57400874	0,57400874	0,57400874	0
228	0,58968304	0,58968304	0,58968304	0
229	0,58442068	0,58383251	0,62157579	0,0824815
230	0,57847669	0,58190299	0,60103754	0,04854799
231	0,60185451	0,60185451	0,60185451	0
232	0,595429	0,595429	0,595429	0
233	0,55230393	0,55230393	0,55230393	0
234	0,60471124	0,61743993	0,66967045	0,11611685
235	0,63923192	0,62471052	0,70192722	0,08331062
236	0,65527369	0,6590806	0,67202076	0,03730105



237	0,6142097	0,6142097	0,6142097	0
238	0,59705627	0,61659584	0,63572552	0,08710829
239	0,65083464	0,6651363	0,67186295	0,08637318
240	0,62006066	0,62006066	0,62006066	0
241	0,58986167	0,58986167	0,58986167	0
242	0,64145396	0,64145396	0,64145396	0
243	0,60792235	0,60792235	0,60792235	0
244	0,64715383	0,64715383	0,64715383	0
245	0,64875512	0,64921655	0,6748746	0,06659081
246	0,67289427	0,68493816	0,71613322	0,08330629
247	0,69564046	0,69552293	0,71059081	0,03853325
248	0,66636685	0,66636685	0,66636685	0
249	0,64851375	0,64851375	0,64851375	0
250	0,70513995	0,70513995	0,70513995	0
251	0,65075716	0,65849111	0,68700461	0,08796279
252	0,68191072	0,68191072	0,7075924	0,05136336
253	0,70464682	0,70464682	0,70464682	0
254	0,66289664	0,66289664	0,66289664	0
255	0,59093961	0,59093961	0,59093961	0
256	0,70142506	0,70142506	0,70331439	0,00377867
257	0,67901115	0,67300645	0,72096566	0,07189963
258	0,68368087	0,68368087	0,70902991	0,05069808
259	0,7145632	0,7145632	0,71933451	0,00954261
260	0,71139665	0,71139665	0,71139665	0
261	0,72619927	0,72619927	0,72619927	0
262	0,61752524	0,61752524	0,63564625	0,03624203
263	0,68518822	0,68624553	0,70685312	0,0443871
264	0,61708307	0,61708307	0,61743898	0,00071182
265	0,62322819	0,63538862	0,65355307	0,09449275
266	0,29865639	0,29865639	0,33421228	0,0711118

267	0,67830973	0,67830973	0,67830973	0
268	0,58857521	0,58857521	0,59362592	0,01010142
269	0,63933788	0,65019697	0,67840612	0,10506491
270	0,6692617	0,67511329	0,697702	0,04705899
271	0,6557425	0,65931515	0,66706101	0,02079174
272	0,62724367	0,62724367	0,62877884	0,00307035
273	0,58111895	0,58111895	0,58111895	0
274	0,65825278	0,65241941	0,69619508	0,06185509
275	0,70498529	0,70740685	0,71580561	0,03296234
276	0,7029434	0,70890325	0,71624382	0,03432284
277	0,71864595	0,71864595	0,71864595	0
278	0,71045542	0,71045542	0,71045542	0
279	0,72749256	0,72749256	0,72773809	0,00049107
281	0,71628711	0,7205661	0,72251006	0,01672489
282	0,72876877	0,72876877	0,72944392	0,0013503
284	0,73291252	0,73291252	0,73291252	0
285	0,74037228	0,74037228	0,74037228	0
286	0,68383913	0,68383913	0,68383913	0
288	-	-	-	0
289	0,56983794	0,58056578	0,61699215	0,11167876
290	0,42427382	0,42072502	0,45947654	0,06685665
291	0,61023343	0,61023343	0,61023343	0
292	0,62878354	0,62390321	0,6584846	0,04964146
293	0,60334618	0,60334618	0,60334618	0
294	0,59949354	0,59949354	0,59949354	0
295	0,63398951	0,63398951	0,63398951	0
296	0,61160111	0,61160111	0,61160111	0
297	0,57530817	0,57530817	0,58541265	0,02020896
298	0,61329804	0,61763311	0,65626003	0,13431775
299	0,64458857	0,64582291	0,67626173	0,2178711

300	0,65987934	0,65987934	0,65987934	0
301	0,41828932	0,41828932	0,41828932	0
302	0,62412482	0,61897159	0,66999781	0,10685517
303	0,66442737	0,66514364	0,66701423	0,01662511
304	0,67731852	0,67731852	0,67731852	0
305	0,58012407	0,58012407	0,58012407	0
306	0,6186634	0,61943281	0,62540564	0,01128271
307	0,56232039	0,56232039	0,56232039	0
308	0,60810097	0,60810097	0,60810097	0
309	0,65051836	0,65807953	0,68675247	0,11475905
310	0,68146796	0,68438805	0,70009499	0,05868379
311	0,68862747	0,69055671	0,70502977	0,0334126
312	0,69223032	0,69223032	0,69223032	0
313	0,69519701	0,7014253	0,70654872	0,0299781
314	0,69844394	0,69952761	0,70344838	0,01606779
315	0,69763307	0,69763307	0,69763307	0
316	0,70101174	0,70101174	0,70101174	0
317	0,69959837	0,70419383	0,70419383	0,01838181
318	0,52749061	0,52749061	0,52749061	0
319	0,63312838	0,62396263	0,68488002	0,11481944
320	0,6567183	0,67299336	0,68856632	0,12254086
321	0,66387878	0,66387878	0,66387878	0
322	0,61456085	0,61699429	0,6190378	0,00868292
323	0,63347475	0,63347475	0,64215598	0,01736246
324	0,57987731	0,57987731	0,57987731	0
325	0,67710594	0,67331264	0,68279589	0,00948324
326	0,68846696	0,68918359	0,70680169	0,0269579
327	0,70272944	0,70272944	0,70272944	0
328	0,67961594	0,69369157	0,70328344	0,0984965
329	0,70212494	0,70261189	0,71792927	0,03515683

330	0,70680187	0,70822016	0,71422154	0,02313232
331	0,70967961	0,70963311	0,7237216	0,03921713
332	0,70035202	0,69997587	0,71316778	0,01939583
333	0,6995078	0,71115434	0,71243742	0,0341708
334	0,71729954	0,71747002	0,72138569	0,01144385
335	0,70806164	0,70806164	0,70991406	0,00370483
336	0,70656863	0,70656863	0,70656863	0
337	0,66647739	0,66647739	0,66647739	0
338	0,71492408	0,71492408	0,71492408	0
339	0,6192149	0,6192149	0,6192149	0
340	0,67189641	0,67189641	0,67189641	0
341	0,61740608	0,61740608	0,61740608	0
342	0,698336	0,698336	0,698336	0
343	0,69475313	0,69475313	0,69475313	0
344	0,67828858	0,67828858	0,67828858	0
345	0,53839048	0,53839048	0,53839048	0
346	0,55567373	0,55567373	0,61968595	0,12802444
347	0,67834273	0,70183367	0,70183367	0,23490942
348	- 0,03990645	- 0,03990645	- 0,03990645	0
349	- 0,01997034	- 0,01997034	- 0,01997034	0
350	- 0,01919138	- 0,01919138	- 0,01919138	0
351	0,34707578	0,34707578	0,34707578	0
352	0,58002021	0,58409542	0,60674235	0,10513498
353	0,56462213	0,58286985	0,6214083	0,22148187
354	0,53872666	0,57944341	0,60280258	0,20958537
355	0,61522207	0,61522207	0,61522207	0
356	0,65343202	0,65343202	0,65343202	0
357	0,64175572	0,64175572	0,64175572	0

358	0,57608918	0,57649614	0,61411282	0,07640542
359	0,61279374	0,61543757	0,68724909	0,13809638
360	0,64598365	0,64747818	0,68199912	0,09577358
361	0,56781354	0,56781354	0,59551286	0,05539864
362	0,41030613	0,41030613	0,41030613	0
363	0,60609532	0,6035316	0,61635022	0,01281862
364	0,63243659	0,6355306	0,6627383	0,05923148
365	0,64137684	0,64137684	0,65057236	0,01839105
366	0,61762935	0,61774915	0,63490901	0,03479891
367	0,65056811	0,65370837	0,69561364	0,12509372
368	0,67799389	0,67981666	0,71301787	0,10106831
369	0,68487036	0,68553922	0,71797769	0,09343987
370	0,69451789	0,69451789	0,69451789	0
371	0,68800694	0,69254754	0,70669354	0,04191382
372	0,70325097	0,70325097	0,70325097	0
373	0,64608011	0,64357606	0,67822409	0,06371057
374	0,68873631	0,68873631	0,68873631	0
375	0,64366718	0,64366718	0,64366718	0
376	0,67973962	0,68296069	0,70779039	0,08318295
377	0,69738297	0,69738297	0,69738297	0
378	0,70028908	0,70282121	0,71598101	0,03391599
379	0,69409243	0,68953172	0,71277671	0,03279625
380	0,67871564	0,68236512	0,70444567	0,08241964
381	0,69577947	0,69593362	0,71138349	0,0285861
382	0,69835917	0,69678841	0,71697113	0,03800636
383	0,70130881	0,69862899	0,70539507	0,00689916
384	0,7022278	0,70243333	0,70617729	0,01126966
385	0,71577561	0,71420209	0,7271702	0,01964214
386	0,65682486	0,65682486	0,65682486	0
387	0,70170064	0,70435508	0,71969347	0,05137692

388	0,70720854	0,70353884	0,71488429	0,01168178
389	0,66458729	0,66458729	0,66458729	0
390	0,68937534	0,68937534	0,68937534	0
391	0,67009618	0,67358937	0,68264914	0,02859911
392	0,69221574	0,69221574	0,69221574	0
393	0,70186954	0,70672286	0,70916591	0,01944607
394	0,3692285	0,3692285	0,70959068	0,68072437
395	-0,7414746	-0,7414746	-0,7414746	0
396	0,35712321	0,35712321	0,71527773	0,71630903
397	0,54446488	0,54211363	0,57409398	0,07740183
398	0,51727404	0,515326	0,58772032	0,21273186
399	0,5594625	0,5594625	0,59082049	0,06271599
400	0,22162235	0,22162235	0,22162235	0
401	0,57387788	0,59039068	0,63354313	0,15235612
402	0,51025621	0,51025621	0,51025621	0
403	0,59608934	0,59608934	0,61417015	0,03616162
404	0,61829839	0,61829839	0,61829839	0
405	0,55635843	0,56037797	0,59746318	0,09712792
406	0,57186781	0,57213816	0,62850932	0,19384197
407	0,57514807	0,59992467	0,65286522	0,27261823
408	0,40217921	0,40217921	0,40217921	0
409	0,59308311	0,59308311	0,59308311	0
410	0,59653484	0,59129884	0,64393203	0,09943851
411	0,59196512	0,59196512	0,59196512	0
412	0,55769415	0,55769415	0,55769415	0
413	0,5898376	0,58416992	0,61569987	0,04191545
414	0,54101787	0,54101787	0,55959463	0,03715352
415	0,57769396	0,56856007	0,6321614	0,09564441
416	0,62422628	0,62601316	0,67824278	0,16333659
417	0,64614421	0,64973222	0,68386005	0,13579136

418	0,6521816	0,64991087	0,6785938	0,04926005
419	0,66046791	0,66046791	0,66046791	0
420	0,61795247	0,61795247	0,61795247	0
421	0,65356223	0,65452183	0,67903116	0,05334698
422	0,64816364	0,64578211	0,67061603	0,03530146
423	0,647201	0,64570857	0,67369069	0,03674967
424	0,59631528	0,59631528	0,59631528	0
425	0,56865057	0,56276368	0,58857755	0,02808017
426	0,57195162	0,5676612	0,62045249	0,11592423
427	0,60422507	0,58854255	0,65636259	0,07290999
428	0,54409832	0,54409832	0,54409832	0
429	0,58573873	0,58573873	0,58573873	0
430	0,66193845	0,66298873	0,68201884	0,03623325
431	0,56479976	0,5327335	0,67631311	0,14725694
432	0,63571395	0,63571395	0,63571395	0
433	0,65382747	0,66109326	0,69220974	0,16278229
434	0,66561219	0,66915365	0,69527596	0,05201421
435	0,66406859	0,66825017	0,68410761	0,06404226
436	0,66501742	0,66254201	0,6911949	0,0396143
437	0,6652647	0,65124254	0,69330901	0,04206647
438	0,68162632	0,68427293	0,69445462	0,03410417
439	0,67310503	0,67310503	0,67310503	0
440	0,40905809	0,646968	0,67332459	1,00435283
441	0,67850354	0,68168935	0,69989245	0,05780685
442	0,67531898	0,67531898	0,6861081	0,02157824
443	0,57996844	0,57996844	0,57996844	0
444	0,53256775	0,5130536	0,64426226	0,20603228
445	0,5285868	0,5285868	0,67090711	0,28464062
446	0,57244382	0,63633296	0,68482875	0,28865899
447	0,68800586	0,68800586	0,68800586	0

	-	-	-	
448	0,47763802	0,47763802	0,24345853	0,46835899
449	0,51965998	0,53727202	0,54780719	0,07804728
450	0,50661255	0,51116669	0,53783457	0,20807054
451	0,5593789	0,56019654	0,56202491	0,00610965
452	0,54079735	0,54410088	0,56449057	0,05490819
453	0,53589521	0,54099189	0,60224483	0,11478627
454	0,54497416	0,54497416	0,57748523	0,06502216
455	0,5479134	0,5479134	0,5479134	0
456	0,56024608	0,56024608	0,56428221	0,00807226
457	0,58386377	0,58386377	0,58386377	0
458	0,44345225	0,44345225	0,44345225	0
459	0,49098667	0,49098667	0,49098667	0
460	0,57273251	0,57550692	0,64271997	0,1839961
461	0,60273624	0,6061031	0,64221578	0,12724897
462	0,62269526	0,62767315	0,65061256	0,05580275
463	0,61283301	0,61283301	0,61283301	0
464	0,63046303	0,64257888	0,64723125	0,04947106
465	0,62494794	0,62494794	0,62494794	0
466	0,63457036	0,6436615	0,6436615	0,02727344
467	0,54168565	0,53806521	0,58015643	0,06970068
468	0,63807405	0,63807405	0,64768692	0,01922575
469	0,64600175	0,64772002	0,64872807	0,00888919
470	0,5734895	0,56792044	0,62675138	0,11201818
471	0,63309599	0,63837641	0,65687181	0,09254785
472	0,64015976	0,64341327	0,65559844	0,04462148
473	0,63507382	0,63507382	0,63507382	0
474	0,61692416	0,64514876	0,64843752	0,09125131
475	0,64041766	0,6382535	0,66721021	0,0399752
476	0,64397195	0,64414191	0,66605517	0,0443364
477	0,486492	0,486492	0,486492	0



478	0,6568749	0,6568749	0,6568749	0
479	0,65400414	0,65400414	0,65400414	0
480	0,52735624	0,52735624	0,52735624	0
481	0,31617319	0,44615801	0,47807343	0,45378531
482	0,59024077	0,56872676	0,6478428	0,10995803
483	-	-	-	-
483	0,21841653	0,21841653	0,45316847	1,34317001
484	-0,5985693	-0,5985693	-0,5985693	0
485	-0,5833331	-0,5833331	-0,5833331	0
486	-	-	-	-
486	0,25105423	0,25105423	0,25105423	0
487	0,40701597	0,41797848	0,52191042	0,23839093
488	0,46064144	0,4710319	0,49647076	0,1011862
489	0,45620004	0,45620004	0,45620004	0
490	0,49140177	0,49140177	0,49140177	0
491	0,51234977	0,51584384	0,56537406	0,14135672
492	0,51397773	0,5249666	0,59340464	0,18873557
493	0,59398391	0,59398391	0,66689242	0,14581703
494	0,5479169	0,54964793	0,62680273	0,18550576
495	0,57960165	0,59284999	0,61352793	0,1025951
496	0,56624748	0,59069416	0,60578486	0,15275892
497	0,59923159	0,59923159	0,61800783	0,03755248
498	0,46556575	0,46556575	0,46556575	0
499	0,59496252	0,59496252	0,62586886	0,06181267
500	0,60194971	0,60375555	0,65178258	0,12713845
501	0,62314749	0,62796047	0,64416596	0,04409913
502	0,58209629	0,59170531	0,63398782	0,10238478
503	0,59556697	0,60776242	0,64753143	0,11612438
504	0,61752067	0,61752067	0,61752067	0
505	0,36434099	0,36218336	0,51826951	0,34969224
506	0,45386294	0,45386294	0,45386294	0

	-	-		
507	0,08581988	0,08581988	0,20663488	0,58490952
508	0,60216616	0,60216616	0,60216616	0
	-	-	-	
509	0,57078852	0,57078852	0,57078852	0
510	0,76867975	0,76867975	0,76867975	0
511	0,85715471	0,85715471	0,85940515	0,00450088
512	0,86000311	0,86000311	0,86000311	0
513	0,72014305	0,72014305	0,72014305	0
514	0,83855288	0,83855288	0,83855288	0
515	0,80575594	0,80575594	0,80575594	0
516	0,79423608	0,83339487	0,87069261	0,27168889
517	0,79902602	0,79902602	0,7991678	0,00028357
518	0,76354373	0,81968778	0,82874759	0,22229369
519	0,7959745	0,7959745	0,7959745	0
383a	0,62373296	0,62373296	0,62373296	0
387a	0,56153259	0,56153259	0,56153259	0

### B.8. Median, minimum, maximum and spread values for the 518 archetypes using true solution Zn

Tableau B.20 CF results (log CF) for true solution Zn for the 518 archetypes

Archetype	Median	Minimum	Maximum	Spread	Spread 95% confidence	Group	Group 95% confidence
1	0,047046351	2,222696913	0,197489579	2,420186492	2,139953524	Q5	Q5
2	0,139288061	0,139288061	0,139288061	0	0	H	H
	-	-	-				
3	0,486913471	0,486913471	0,486913471	0	0	H	H
4	0,216788167	0,041944141	0,220371784	0,178427643	0,165583113	H	H
5	0,212495667	0,059955356	0,23641633	0,176460974	0,167637925	H	H
6	0,215200178	0,215200178	0,215200178	0	0	H	H

7	- 4,744047293	- 4,744047293	- 4,744047293	0	0	F	F
8	- 0,105416218	- 3,641283177	0,157992549	3,799275726	3,529999491	Q5	Q5
9	- 0,20359945	- 2,060301979	0,243456138	2,303758117	2,201354976	Q5	Q5
10	- 0,212111134	- 1,964169513	2,303758117	4,26792763	0,118916873	Q5	H
11	- 0,227688654	- 0,042433673	0,257695619	0,215261946	0,204498848	H	H
12	- 1,246369877	- 3,960625184	0,217171825	4,177797009	4,130892391	Q5	Q5
13	- 0,222009736	- 0,474317771	0,261543041	0,735860811	0,626389996	H	H
14	- 0,184381785	- 0,145355789	0,223407781	0,078051991	0,074149392	H	H
15	- -3,45338889	- 5,020422268	0,22533876	5,245761028	4,941216147	Q4	Q4
16	- 6,197265137	- 6,197265137	6,197265137	0	0	E	E
17	- 0,290185861	- 0,837685669	0,257313947	1,094999616	1,040249635	H	H
18	- 0,226778157	- 6,571652248	0,265390568	6,837042816	4,92103681	Q5	Q5
19	- 0,266653964	- 0,233219233	0,289645914	0,056426681	0,047764142	H	H
20	- 0,280368557	- 0,060035667	0,303096095	0,243060427	0,144269821	H	H
21	- 0,262876302	- 0,262876302	0,262876302	0	0	H	H
22	- 0,277357109	- 0,276948924	0,277765293	0,000816369	0,000775551	H	H
23	- 0,251749373	- 0,218247733	0,285251014	0,06700328	0,063653116	H	H
24	- 0,622070976	- 0,622070976	0,622070976	0	0	H	H
25	- 0,258302338	- 1,769147635	0,268248277	2,037395912	1,734300356	Q5	H
26	- 0,264598114	- 0,242304042	0,271214676	0,028910634	0,027707921	H	H
27	- 0,277866889	- 0,265993836	0,289739943	0,023746107	0,022558802	H	H
28	- 0,271798909	- 0,267948283	0,275649534	0,007701251	0,007316188	H	H

29	0,268089678	0,260904528	0,273084333	0,012179804	0,011570814	H	H
30	0,275216963	0,269079167	0,290077762	0,020998595	0,019948666	H	H
31	0,270520721	0,264572897	0,286132263	0,021559366	0,020179545	H	H
32	0,284061139	0,270139137	0,297795691	0,027656553	0,027003444	H	H
33	0,277039575	0,272293497	0,281785652	0,009492154	0,009017547	H	H
34	0,27552446	0,27552446	0,27552446	0	0	H	H
35	0,270846024	0,263813747	0,2778783	0,014064553	0,013361325	H	H
36	0,280082176	0,274685507	0,285478845	0,010793338	0,010253671	H	H
37	0,229827743	0,229827743	0,229827743	0	0	H	H
38	0,282888868	0,282888868	0,282888868	0	0	H	H
39	0,258236685	0,258236685	0,258236685	0	0	H	H
40	- 5,880464709	- 12,01619527	0,255265855	12,27146113	11,65788807	Q3	Q3
41	- 13,52230524	- 13,52230524	- 13,52230524	0	0	A	A
42	- 10,57544534	- 10,57544534	- 10,57544534	0	0	B	B
43	0,034556662	0,004349347	0,064763977	0,06041463	0,057393898	H	H
44	0,193462596	0,193382981	0,193542211	0,00015923	0,000151269	H	H
45	0,095692358	0,095692358	0,095692358	0	0	H	H
46	- 4,881452075	- 4,881452075	- 4,881452075	0	0	F	F
47	- 0,562542381	- 5,629993975	0,17579916	5,805793135	5,557152691	Q5	Q5
48	0,172045403	-0,0484636	0,238761493	0,287225093	0,262451738	H	H
49	0,198633407	0,098069114	0,225631023	0,127561908	0,123338261	H	H
50	-5,64178516	-5,64178516	-5,64178516	0	0	E	E
51	- 0,209746301	- 3,120955011	0,214649755	3,335604767	3,168824528	Q5	Q5
52	0,21838802	0,028913186	0,243656852	0,214743666	0,195977941	H	H
53	0,248121142	0,236308711	0,27404677	0,037738059	0,035040418	H	H
54	0,260682789	0,249521069	0,266242103	0,016721033	0,015616243	H	H

55	0,241993327	0,101833153	0,241993327	0,140160175	0,128378985	H	H
56	0,25354831	0,246736946	0,260359674	0,013622727	0,012941591	H	H
57	0,24948745	0,24948745	0,24948745	0	0	H	H
58	0,230392845	0,209832903	0,250952787	0,041119884	0,039063889	H	H
59	0,265362727	0,265362727	0,265362727	0	0	H	H
60	0,242254285	0,242254285	0,242254285	0	0	H	H
61	0,248159575	0,248159575	0,253165843	0,005006268	0,004130171	H	H
62	0,273649839	0,273649839	0,273649839	0	0	H	H
63	0,256118	0,256118	0,256118	0	0	H	H
64	0,26847521	0,26847521	0,26847521	0	0	H	H
65	0,254674787	0,254674787	0,254674787	0	0	H	H
66	0,254924728	0,254924728	0,254924728	0	0	H	H
67	0,267600044	0,267600044	0,267600044	0	0	H	H
68	-6,35693515	12,11641483	0,597455467	11,51895937	10,9430114	Q2	Q2
69	0,751907292	0,751907292	0,751907292	0	0	H	H
70	0,670108147	1,756988796	0,401861488	1,355127308	1,287370943	H	H
71	0,127072959	1,843836052	0,169988395	2,013824447	1,260411304	Q5	H
72	0,096064173	0,018731541	0,162322525	0,143590983	0,132653979	H	H
73	0,923096937	1,151472379	0,694721495	0,456750884	0,43391334	H	H
74	0,116186632	0,220050196	0,214901938	0,434952134	0,404894164	H	H
75	0,005678409	0,005678409	0,005678409	0	0	H	H
76	0,181491667	0,181491667	0,181491667	0	0	H	H
77	4,858728562	4,951821867	4,858728562	0,093093305	0,093093305	F	F
78	0,079035997	4,924142328	0,209197977	5,133340306	4,783860934	Q5	Q5
79	0,183341694	-	0,23616661	1,569886979	0,840825603	H	H

		1,333720368					
80	0,171772032	0,014098617	0,233043644	0,247142261	0,224159403	H	H
81	0,120938118	0,120938118	0,120938118	0	0	H	H
82	- 4,121819896	- 4,121819896	- 4,121819896	0	0	F	F
83	- 2,865932376	- 2,865932376	- 2,865932376	0	0	G	G
84	- 0,656558815	- 5,661372742	0,201229613	5,862602356	5,831739896	Q5	Q5
85	0,180523214	0,551938062	0,241312081	0,793250143	0,789827995	H	H
86	0,165006726	0,146846509	0,257892965	0,111046456	0,104131171	H	H
87	- 3,550454076	- 6,157982843	- 1,164620614	4,993362228	4,878088965	Q4	Q4
88	- 6,286266552	- 6,782804394	- 5,789728711	0,993075683	0,943421899	E	E
89	- 0,393025615	- 6,264018711	0,219624213	6,483642923	6,161551568	Q5	Q5
90	- 0,22710098	- 4,719143386	0,265781298	4,984924684	0,096027101	Q5	H
91	0,245713701	0,206444933	0,27483154	0,068386607	0,045702759	H	H
92	0,260005955	0,188209543	0,273144609	0,084935067	0,051971807	H	H
93	0,232167326	0,206695379	0,255552269	0,04885689	0,046414045	H	H
94	0,246967037	0,235228826	0,258705247	0,023476421	0,0223026	H	H
95	0,228481132	0,228481132	0,228481132	0	0	H	H
96	0,243525597	0,219269704	0,250084462	0,030814758	0,028546126	H	H
97	0,239767966	0,239767966	0,239767966	0	0	H	H
98	0,25546785	0,25546785	0,25546785	0	0	H	H
99	0,203157624	0,19623801	0,210077238	0,013839228	0,013147266	H	H
100	- 8,579827847	- 8,579827847	- 8,579827847	0	0	C	C
101	- 4,220102401	- 6,669607352	- 0,128193539	6,541413812	6,336339459	Q3	Q3

102	0,221690818	- 4,655562662	0,253794522	4,909357184	2,991789571	Q5	Q5
103	0,267304786	0,228538054	0,275060149	0,046522094	0,044195989	H	H
104	0,245838638	0,24276369	0,248913587	0,006149897	0,005842403	H	H
105	0,274499112	0,274499112	0,274499112	0	0	H	H
106	0,210747337	0,210747337	0,210747337	0	0	H	H
107	- 8,537888985	- 8,537888985	- 8,537888985	0	0	C	C
108	- 8,749330781	- 8,749330781	- 8,749330781	0	0	C	C
109	0,241226408	0,194298459	0,259509036	0,065210577	0,061950048	H	H
110	0,256577529	0,235068063	0,261374013	0,026305949	0,026305949	H	H
111	0,269156016	0,267984429	0,270327604	0,002343175	0,002343175	H	H
112	0,243547462	0,158584975	0,251504785	0,092919811	0,081263867	H	H
113	0,257781389	0,21912664	0,279369477	0,060242837	0,046789297	H	H
114	0,272961923	0,244432622	0,279734579	0,035301957	0,032338805	H	H
115	0,257029023	0,2416166	0,272441446	0,030824845	0,029283603	H	H
116	0,262125771	0,244054575	0,277905127	0,033850552	0,03187704	H	H
117	0,268921097	0,261839198	0,276617106	0,014777908	0,014663116	H	H
118	0,263365492	0,263365492	0,263365492	0	0	H	H
119	0,265029675	0,25339976	0,27665959	0,02325983	0,022096839	H	H
120	- 3,445952918	- 3,445952918	- 3,445952918	0	0	G	G
121	- 4,114887014	- 8,461403976	- 0,231629948	8,693033924	8,258382228	Q3	Q3
122	- 7,837446062	- 7,837446062	- 7,837446062	0	0	D	D
123	0,219409606	0,215050274	0,223768937	0,008718663	0,00828273	H	H
124	0,250512452	0,247876333	0,25842799	0,010551657	0,010024074	H	H
125	0,25865687	0,252993136	0,264320605	0,011327469	0,010761096	H	H
126	0,266732305	0,253337287	0,271803923	0,018466636	0,017842381	H	H
127	-4,89707679	-	0,239591972	10,27333752	9,759670647	Q3	Q3

		10,03374555					
128	0,248934889	0,214288595	0,256327393	0,042038798	0,033950102	H	H
129	0,216962193	0,216962193	0,216962193	0	0	H	H
130	0,270748023	- 11,60402203	0,270748023	11,87477005	9,797495994	Q5	Q5
131	0,266364859	0,266364859	0,266364859	0	0	H	H
132	0,262452352	- 12,45938038	0,26453989	12,72392027	12,08772426	Q5	Q5
133	0,093653452	0,016657763	0,134543176	0,117885413	0,110825201	H	H
134	0,073518316	0,020447631	0,164501343	0,144053712	0,13780734	H	H
135	0,084917623	-0,01179272	0,084917623	0,096710342	0,091874825	H	H
136	- 1,254033008	- 1,254033008	- 1,254033008	0	0	H	H
137	0,148181613	- 0,478356587	0,185180268	0,663536855	0,630360012	H	H
138	0,024725522	0,024725522	0,024725522	0	0	H	H
139	0,116599712	0,116599712	0,116599712	0	0	H	H
140	0,136974409	0,136974409	0,136974409	0	0	H	H
141	0,124080804	- 3,182394534	0,1850928	3,367487334	3,086181681	Q5	Q5
142	0,161266603	0,100071615	0,194428423	0,094356808	0,091782656	H	H
143	0,141035805	0,113817754	0,168253856	0,054436102	0,051714297	H	H
144	- 6,821520394	- 6,821520394	- 6,821520394	0	0	D	D
145	- 0,132234569	- 6,156162613	0,202462925	6,358625538	6,040694261	Q5	Q5
146	0,168626763	0,123686271	0,213567256	0,089880985	0,085386936	H	H
147	-4,03961688	-4,03961688	-4,03961688	0	0	F	F
148	- 0,955318753	- 0,955318753	- 0,955318753	0	0	H	H
149	0,030136607	0,030136607	0,030136607	0	0	H	H
150	0,204351192	0,176064363	0,232638021	0,056573658	0,053744975	H	H
151	0,223881665	0,156857612	0,246550418	0,089692806	0,083153902	H	H



152	0,232061579	0,22505542	0,250521598	0,025466178	0,024759126	H	H
153	0,24290291	0,233439242	0,252366577	0,018927336	0,017980969	H	H
154	0,231056757	0,230952044	0,231161471	0,000209428	0,000209428	H	H
155	0,171665302	0,171665302	0,171665302	0	0	H	H
156	0,217692341	0,192476276	0,228251068	0,035774793	0,033971317	H	H
157	0,244308672	0,242538442	0,246078902	0,00354046	0,003363437	H	H
158	- 6,628398568	- 6,628398568	- 6,628398568	0	0	E	E
159	- 7,813029632	- 7,827757521	- 7,798301744	0,029455777	0,027982988	D	D
160	0,207236613	0,207236613	0,207236613	0	0	H	H
161	0,259791446	0,241782799	0,259791446	0,018008647	0,017108215	H	H
162	0,248123328	0,248123328	0,248123328	0	0	H	H
163	- 9,080614527	- 9,080614527	- 9,080614527	0	0	C	C
164	0,236186455	0,198901943	0,251100178	0,052198235	0,04796446	H	H
165	0,216581565	0,207976687	0,2482358	0,040259114	0,038246158	H	H
166	0,249820892	0,249820892	0,249820892	0	0	H	H
167	0,262659531	0,262659531	0,262659531	0	0	H	H
168	0,266394728	0,266394728	0,266394728	0	0	H	H
169	- 4,267556648	- 8,653366888	- 0,118253592	8,77162048	8,333039456	Q3	Q3
170	0,24305736	0,24305736	0,24305736	0	0	H	H
171	0,229482538	0,229482538	0,229482538	0	0	H	H
172	- 0,245500247	- 0,245500247	- 0,245500247	0	0	H	H
173	0,087703437	-0,23274928	0,146766748	0,379516028	0,366134911	H	H
174	0,116760863	0,019270069	0,158628656	0,139358587	0,127813391	H	H
175	- 0,078468918	- 0,139763088	- 0,017174747	0,122588341	0,116458924	H	H
176	0,161785747	0,354399186	0,176907131	0,531306317	0,465620062	H	H

177	0,177483124	0,177483124	0,177483124	0	0	H	H
178	0,1968373	0,1968373	0,1968373	0	0	H	H
179	0,182328847	0,182328847	0,182328847	0	0	H	H
180	0,129122241	- 4,696598846	0,170100026	4,866698872	0,533360801	Q5	H
181	0,158511113	0,026090162	0,202237985	0,176147824	0,148225184	H	H
182	0,179881249	0,154125899	0,204182028	0,050056129	0,047012373	H	H
183	- 2,747903098	- 2,747903098	- 2,747903098	0	0	G	G
184	0,074426647	- 3,725730398	0,196625224	3,922355621	3,542681325	Q5	Q5
185	0,178046964	- 0,207217533	0,2061991	0,413416633	0,349850477	H	H
186	- 5,459346811	- 5,459346811	- 5,459346811	0	0	E	E
187	0,182200944	0,182200944	0,182200944	0	0	H	H
188	-5,23271763	-5,23271763	-5,23271763	0	0	E	E
189	- 6,934181531	- 6,934181531	- 6,934181531	0	0	D	D
190	0,167089214	- 2,273976716	0,206414168	2,480390883	2,321418694	Q5	Q5
191	0,20757975	- 3,601780718	0,229090425	3,830871143	2,193074284	Q5	Q5
192	0,21738567	0,184022877	0,244176185	0,060153307	0,042757815	H	H
193	0,241894772	0,232133989	0,247899222	0,015765233	0,014505521	H	H
194	0,232818999	0,229849906	0,235788091	0,005938185	0,005641275	H	H
195	0,221711352	0,206587	0,226788492	0,020201492	0,018155148	H	H
196	0,180102818	0,180102818	0,180102818	0	0	H	H
197	0,214600283	0,207471353	0,221729213	0,01425786	0,013544967	H	H
198	- 5,531901044	- 6,083941007	0,214716675	6,298657682	5,945099782	Q3	Q3
199	0,212447365	0,212447365	0,212447365	0	0	H	H
200	0,168943379	0,168943379	0,168943379	0	0	H	H

201	0,051949951	0,051949951	0,051949951	0	0	H	H
202	0,203747186	0,151409986	0,230426194	0,079016208	0,069618918	H	H
203	0,134600196	0,064782315	0,204418077	0,139635761	0,132653973	H	H
204	- 7,708627028	- 7,708627028	- 7,708627028	0	0	D	D
205	0,039238676	0,039238676	0,039238676	0	0	H	H
206	- 9,365119128	- 9,365119128	- 9,365119128	0	0	C	C
207	- 8,214000269	- 8,214000269	- 8,214000269	0	0	C	C
208	0,222343075	0,217835539	0,228618653	0,010783114	0,010650511	H	H
209	0,240997748	0,235836509	0,244590553	0,008754044	0,008285772	H	H
210	0,22626444	0,12777715	0,228528766	0,100751616	0,093265951	H	H
211	0,227864334	- 8,141801988	0,24640066	8,388202648	7,788192452	Q5	Q5
212	0,23541715	0,210695793	0,244963526	0,034267733	0,03242981	H	H
213	0,228587425	0,214058083	0,243116767	0,029058684	0,02760575	H	H
214	0,23654788	0,236539518	0,242374886	0,005835368	0,0055436	H	H
215	0,239621998	0,232678781	0,245804522	0,01312574	0,012032256	H	H
216	0,24913147	0,244875256	0,253387685	0,008512429	0,008086807	H	H
217	- 6,668219745	- 6,668219745	- 6,668219745	0	0	E	E
218	0,24086678	0,24086678	0,24086678	0	0	H	H
219	0,208829046	0,208829046	0,208829046	0	0	H	H
220	-7,57591261	-7,57591261	-7,57591261	0	0	D	D
221	0,21229524	0,210303471	0,22887581	0,018572339	0,017643722	H	H
222	- 8,398502378	- 8,398502378	- 8,398502378	0	0	C	C
223	0,07556198	0,07556198	0,07556198	0	0	H	H
224	0,173963794	- 11,11820354	0,239369497	11,35757303	10,23389693	Q5	Q5
225	- 11,01447522	- 11,14024994	- 10,96392392	0,17632602	0,167509719	B	B

226	-11,0152711	11,43207308	10,52890378	0,903169303	0,838111931	B	B
227	0,0385878	0,0385878	0,0385878	0	0	H	H
228	0,074135143	0,074135143	0,074135143	0	0	H	H
229	0,08412488	0,051293482	0,129693726	0,078400244	0,073525548	H	H
230	0,093828829	0,064513762	0,112188275	0,047674513	0,045290788	H	H
231	0,113091638	0,113091638	0,113091638	0	0	H	H
232	-4,67370315	-4,67370315	-4,67370315	0	0	F	F
233	0,065237471	0,065237471	0,065237471	0	0	H	H
234	0,116841482	3,996024649	0,170872008	4,166896657	3,189013994	Q5	Q5
235	0,135072905	0,125003824	0,210164878	0,085161054	0,065612311	H	H
236	0,168541169	0,145822302	0,180958783	0,03513648	0,033379656	H	H
237	3,565781321	3,565781321	3,565781321	0	0	F	F
238	-0,33035362	4,605078312	0,1393098	4,744388112	3,854067304	Q5	Q5
239	0,16937509	0,066348402	0,1779652	0,111616798	0,101575546	H	H
240	0,127035129	0,127035129	0,127035129	0	0	H	H
241	5,569618785	5,569618785	5,569618785	0	0	E	E
242	1,210963683	1,210963683	1,210963683	0	0	H	H
243	5,386061297	5,386061297	5,386061297	0	0	E	E
244	0,120072436	0,120072436	0,120072436	0	0	H	H
245	0,108855662	6,350732492	0,165629561	6,516362052	5,230313029	Q5	Q5
246	0,179322616	0,068914306	0,227897627	0,158983322	0,134130408	H	H
247	0,196927688	0,17425961	0,219769846	0,045510237	0,041268987	H	H
248	0,175690485	0,175690485	0,175690485	0	0	H	H
249	0,160197695	0,160197695	0,160197695	0	0	H	H
250	0,217560923	0,217560923	0,217560923	0	0	H	H

		-					
251	0,146970436	1,708871433	0,162698647	1,87157008	1,731526617	H	H
252	0,179135776	0,149937957	0,208333595	0,058395638	0,055475857	H	H
253	0,215999342	0,215999342	0,215999342	0	0	H	H
	-	-	-				
254	0,101211619	0,101211619	0,101211619	0	0	H	H
	-	-	-				
255	1,449024161	1,449024161	1,449024161	0	0	H	H
256	0,208529904	0,207355302	0,209704505	0,002349203	0,002231743	H	H
257	0,175874481	-0,11034276	0,227396306	0,337739066	0,313507311	H	H
258	0,180688878	0,152796188	0,208581568	0,055785379	0,05299611	H	H
259	0,221500989	0,213737117	0,22926486	0,015527743	0,014751356	H	H
260	0,220128145	0,220128145	0,220128145	0	0	H	H
261	0,237871081	0,237871081	0,237871081	0	0	H	H
	-	-					
262	4,711224604	9,551346935	0,128897727	9,680244662	9,196232429	Q3	Q3
263	0,165871321	0,135439382	0,20555943	0,070120048	0,066614045	H	H
264	0,12264388	0,122277196	0,123010564	0,000733368	0,0006967	H	H
	-						
265	0,005028799	-0,41909527	0,156630937	0,575726207	0,541405838	H	H
	-	-	-				
266	0,188425259	0,223932607	0,152917911	0,071014696	0,067463961	H	H
267	0,115312629	0,115312629	0,115312629	0	0	H	H
	-	-	-				
268	3,142234825	3,787787806	2,496681843	1,291105963	1,226550665	G	G
		-					
269	0,085810437	1,719480356	0,185696093	1,905176449	1,650778971	H	H
		-					
270	0,090045166	0,570866222	0,193176171	0,764042393	0,744497145	H	H
		-	-				
271	-0,39882247	0,879137062	0,172155541	0,706981521	0,66902333	H	H
	-	-	-				
272	4,814150184	5,623324283	4,004976086	1,618348197	1,537430788	F	F
	-	-	-				
273				0	0	F	F

	4,704735789	4,704735789	4,704735789				
274	-0,18832017	4,074022612	0,201272554	4,275295167	3,964966366	Q5	Q5
275	0,218379685	0,178468567	0,226010362	0,047541795	0,042121754	H	H
276	0,219691178	0,194452009	0,227374391	0,032922381	0,031839231	H	H
277	0,231391769	0,231391769	0,231391769	0	0	H	H
278	0,219628066	0,219628066	0,219628066	0	0	H	H
279	0,238324905	0,238183455	0,238466355	0,0002829	0,000268755	H	H
281	0,228235871	0,209054584	0,232818017	0,023763433	0,022575261	H	H
282	0,237872494	0,236032269	0,23971272	0,003680451	0,003496429	H	H
284	0,244771297	0,244771297	0,244771297	0	0	H	H
285	0,253302896	0,253302896	0,253302896	0	0	H	H
286	0,127823659	0,127823659	0,127823659	0	0	H	H
288	11,44194999	11,44194999	11,44194999	0	0	B	B
289	0,075729942	-0,66811071	0,122436904	0,790547614	0,634501193	H	H
290	0,066510963	0,094582717	0,027993198	0,066589519	0,063260043	H	H
291	0,052963268	0,052963268	0,052963268	0	0	H	H
292	0,125594738	0,231117273	0,164141533	0,395258806	0,366865295	H	H
293	0,110024178	0,110024178	0,110024178	0	0	H	H
294	4,794937116	4,794937116	4,794937116	0	0	F	F
295	0,006873595	0,006873595	0,006873595	0	0	H	H
296	3,945696042	3,945696042	3,945696042	0	0	F	F
297	2,618132109	5,319720531	0,083456313	5,403176845	5,133018003	Q4	Q4
298	0,114704742	2,992549524	0,160351361	3,152900885	2,257533922	Q5	Q5
299	0,149124251	1,160514668	0,187290343	1,347805011	0,069330249	H	H

300	0,169064161	0,169064161	0,169064161	0	0	H	H
301	- 0,068979775	- 0,068979775	- 0,068979775	0	0	H	H
302	- 0,453391301	- 2,451033396	0,16938969	2,620423086	2,160302053	Q5	Q5
303	0,088889468	0,059340373	0,137326312	0,077985939	0,063998045	H	H
304	0,183131288	0,183131288	0,183131288	0	0	H	H
305	-5,72516887	-5,72516887	-5,72516887	0	0	E	E
306	- 3,950658384	- 5,166669296	0,092722456	5,259391752	5,226423378	Q4	Q4
307	- 6,891255446	- 6,891255446	6,891255446	0	0	D	D
308	- 5,501305664	- 5,501305664	5,501305664	0	0	E	E
309	0,125178994	- 5,854080856	0,197850362	6,051931218	5,926453682	Q5	Q5
310	0,183055141	0,133529195	0,211097862	0,077568667	0,057720253	H	H
311	0,195427104	0,144819215	0,216482291	0,071663076	0,061635238	H	H
312	0,203295654	0,203295654	0,203295654	0	0	H	H
313	0,209467375	0,188974961	0,218362392	0,029387431	0,027671879	H	H
314	0,209074759	0,199855303	0,215242367	0,015387064	0,013915817	H	H
315	0,101188891	0,101188891	0,101188891	0	0	H	H
316	0,213407626	0,213407626	0,213407626	0	0	H	H
317	0,214383214	0,197715677	0,214383214	0,016667537	0,015417472	H	H
318	- 7,173674735	- 7,173674735	- 7,173674735	0	0	D	D
319	- 1,620088944	- 7,583501468	0,169464904	7,752966373	7,689434943	Q5	Q5
320	0,155493893	- 6,265635664	0,187793105	6,453428768	5,747010278	Q5	Q5
321	0,17496693	0,17496693	0,17496693	0	0	H	H
322	- 6,743473051	- 7,263239575	- 4,283601642	2,979637933	2,840097507	Q2	Q2

323	- 2,150905743	- 3,387052863	- 0,914758624	2,472294239	2,348679527	Q4	Q4
324	- 8,716080351	- 8,716080351	- 8,716080351	0	0	C	C
325	0,163343631	0,163343631	0,18447878	0,021135148	0,021135148	H	H
326	0,19560088	0,181188198	0,214727772	0,033539574	0,033317809	H	H
327	0,202931993	0,202931993	0,202931993	0	0	H	H
328	0,201128034	- 0,870939809	0,21357461	1,084514419	0,949888397	H	H
329	0,207655327	0,171880846	0,229207488	0,057326642	0,051568345	H	H
330	0,218418175	0,185299825	0,219944114	0,034644289	0,031132264	H	H
331	0,219966181	0,193931715	0,235898613	0,041966897	0,017822868	H	H
332	0,210930895	0,202107299	0,223710929	0,021603629	0,021603629	H	H
333	0,223669604	0,173191437	0,225129832	0,051938396	0,046382083	H	H
334	0,230062838	0,222258292	0,233235613	0,010977321	0,008938964	H	H
335	0,220114953	0,217914606	0,222315301	0,004400695	0,00418066	H	H
336	0,217860067	0,217860067	0,217860067	0	0	H	H
337	0,177137057	0,177137057	0,177137057	0	0	H	H
338	0,227873413	0,227873413	0,227873413	0	0	H	H
339	- 2,620735134	- 2,620735134	- 2,620735134	0	0	G	G
340	0,167893066	0,167893066	0,167893066	0	0	H	H
341	- 6,072045619	- 6,072045619	- 6,072045619	0	0	E	E
342	0,195739658	0,195739658	0,195739658	0	0	H	H
343	0,185573636	0,185573636	0,185573636	0	0	H	H
344	0,189386964	0,189386964	0,189386964	0	0	H	H
345	-9,97412221	-9,97412221	-9,97412221	0	0	C	C
346	0,042519951	-0,01659627	0,101636172	0,118232442	0,11232082	H	H
347	0,210972779	-9,60262593	0,210972779	9,813598708	7,605538999	Q5	Q5
348	- 11,66024113	- 11,66024113	- 11,66024113	0	0	B	B



349	- 8,657699513	- 8,657699513	- 8,657699513	0	0	C	C
350	- 13,55524779	- 13,55524779	- 13,55524779	0	0	A	A
351	- 11,91708847	- 11,91708847	- 11,91708847	0	0	B	B
352	0,028941292	- 0,595150796	0,098683237	0,693834032	0,601631124	H	H
353	0,087720449	- 0,087299665	0,130654662	0,217954328	0,185868729	H	H
354	0,090841169	- 0,093953096	0,113844374	0,207797469	0,195421884	H	H
355	- 0,471816307	- 0,471816307	- 0,471816307	0	0	H	H
356	0,073340608	0,073340608	0,073340608	0	0	H	H
357	0,150887376	0,150887376	0,150887376	0	0	H	H
358	- 0,191294165	- 2,473439705	0,103836588	2,577276293	2,2863026	Q5	Q5
359	0,100482737	-4,03145723	0,166597606	4,198054836	1,729851248	Q5	H
360	0,140206156	- 0,327344046	0,182091852	0,509435898	0,34976473	H	H
361	0,08024623	0,052675308	0,107817152	0,055141844	0,052384752	H	H
362	-0,07694113	-0,07694113	-0,07694113	0	0	H	H
363	-1,76455601	- 3,740457962	-1,76455601	1,975901952	1,778311756	G	G
364	- 0,422730264	- 2,397174116	0,113414175	2,510588292	2,487504194	Q5	Q5
365	- 0,457037933	- 0,545120843	0,368955023	0,17616582	0,167357529	H	H
366	- 1,987807023	- 4,346765448	0,125186319	4,471951767	4,439937892	Q5	Q5
367	0,145763114	- 6,941596549	0,204500603	7,146097153	6,168921547	Q5	Q5
368	0,18592522	- 1,474969017	0,223830968	1,698799985	0,137742105	H	H

369	0,191665034	0,137168316	0,230269794	0,093101478	0,073086973	H	H
370	0,202090898	0,202090898	0,202090898	0	0	H	H
371	0,203628247	0,177512398	0,214576854	0,037064456	0,035211234	H	H
372	0,215889768	0,215889768	0,215889768	0	0	H	H
373	0,156564335	0,127287971	0,190625663	0,063337692	0,061926765	H	H
374	0,201619301	0,201619301	0,201619301	0	0	H	H
375	- 0,857497296	- 0,857497296	- 0,857497296	0	0	H	H
376	0,187745904	- 2,716632834	0,213684571	2,930317405	2,424112859	Q5	Q5
377	0,207381747	0,207381747	0,207381747	0	0	H	H
378	0,214670872	0,189383751	0,227235014	0,037851263	0,0359587	H	H
379	0,199939128	0,185577511	0,220153137	0,034575626	0,0324836	H	H
380	0,189121255	- 8,934864291	0,209323358	9,144187649	7,097487599	Q5	Q5
381	0,204936904	0,172888895	0,22331493	0,050426035	0,036445336	H	H
382	0,207972125	0,183076466	0,225146482	0,042070016	0,040842187	H	H
383	0,210470542	0,210232541	0,215284646	0,005052105	0,005028305	H	H
384	0,214013993	0,206831427	0,216755508	0,009924081	0,006749144	H	H
385	0,226570054	0,219369434	0,238980754	0,01961132	0,018308573	H	H
386	0,167167096	0,167167096	0,167167096	0	0	H	H
387	0,216779428	0,177234897	0,23250101	0,055266113	0,050970308	H	H
388	0,216423971	0,215772951	0,227787135	0,012014184	0,011413475	H	H
389	0,173893435	0,173893435	0,173893435	0	0	H	H
390	0,189469306	0,189469306	0,189469306	0	0	H	H
391	0,065872398	0,008922728	0,185889667	0,176966939	0,168118592	H	H
392	0,1948731	0,1948731	0,1948731	0	0	H	H
393	0,210814995	0,191899439	0,216100405	0,024200965	0,022990917	H	H
394	- 6,443881024	- 13,10531389	0,217551845	13,32286574	12,65672245	Q2	Q2
395	- 13,70031165	- 13,70031165	- 13,70031165	0	0	A	A

396	-5,31478416	10,85688401	0,227315685	11,08419969	10,52998971	Q3	Q3
397	0,042844875	2,060783806	0,077211999	2,137995806	1,723519217	Q5	H
398	0,025785568	-0,89560576	0,096813538	0,992419298	0,382457245	H	H
399	0,070657319	0,039890804	0,101423834	0,06153303	0,058456378	H	H
400	- 0,265438015	- 0,265438015	- 0,265438015	0	0	H	H
401	0,044018802	0,006852332	0,107954031	0,114806363	0,113382028	H	H
402	0,022388528	0,022388528	0,022388528	0	0	H	H
403	0,089187942	0,079435288	0,098940595	0,019505307	0,018530041	H	H
404	0,121778137	0,121778137	0,121778137	0	0	H	H
405	0,054101568	5,253981198	0,099092196	5,353073394	1,999213642	Q5	H
406	0,069998781	3,144958429	0,133040173	3,277998602	2,181760107	Q5	Q5
407	0,099745421	0,107007652	0,161252874	0,268260526	0,236285235	H	H
408	- 0,085023321	- 0,085023321	- 0,085023321	0	0	H	H
409	- 4,349888348	- 4,349888348	- 4,349888348	0	0	F	F
410	- 0,587621483	- 4,693875962	- 0,090411578	4,78428754	4,480966774	Q5	Q5
411	- 0,132529321	- 0,132529321	- 0,132529321	0	0	H	H
412	- 5,781168896	- 5,781168896	- 5,781168896	0	0	E	E
413	- 0,510429224	- 4,554678869	- 0,014519759	4,569198628	4,432219449	Q5	Q5
414	- 4,032619727	- 5,992588331	- 2,072651124	3,919937207	3,723940347	Q3	Q3
415	0,055210243	5,915918434	0,1408618	6,056780233	3,146387936	Q5	Q5

416	0,123338679	6,544581533	0,18925165	6,733833183	1,232063068	Q5	H
417	0,150473619	0,060377305	0,19293909	0,132561785	0,111040051	H	H
418	0,158516175	0,130186459	0,188681273	0,058494814	0,055075924	H	H
419	0,173192451	0,173192451	0,173192451	0	0	H	H
420	0,130649294	0,130649294	0,130649294	0	0	H	H
421	0,166423691	0,138238425	0,190386016	0,052147591	0,051388786	H	H
422	0,145936348	0,126353612	0,182047406	0,055693794	0,05286919	H	H
423	0,157940238	0,149429973	0,186313878	0,036883906	0,03262786	H	H
424	0,10893916	0,10893916	0,10893916	0	0	H	H
425	-7,35338865	7,526882256	6,797254638	0,729627618	0,700929588	D	D
426	3,624975854	7,186249981	0,112374626	7,298624606	7,224213089	Q4	Q4
427	2,203032822	-6,52725294	0,133136642	6,660389582	6,497983884	Q4	Q4
428	7,415083194	7,415083194	7,415083194	0	0	D	D
429	6,385255605	6,385255605	6,385255605	0	0	E	E
430	0,167137309	0,153008408	0,19120004	0,038191632	0,035565852	H	H
431	0,221923523	0,257834739	0,186289782	0,444124521	0,443232613	H	H
432	0,141448653	0,141448653	0,141448653	0	0	H	H
433	0,169941504	9,058566299	0,203343209	9,261909508	0,093924797	Q5	H
434	0,176375185	0,126833186	0,206227723	0,079394537	0,048382089	H	H
435	0,179173718	0,128571202	0,188608898	0,060037696	0,053809698	H	H
436	0,174020366	0,163312324	0,202635953	0,039323629	0,034394896	H	H
437	0,162663826	0,162663826	0,204851196	0,04218737	0,040078001	H	H
438	0,196963082	0,172236682	0,204947376	0,032710693	0,029939978	H	H
439	0,18561336	0,18561336	0,18561336	0	0	H	H
440	0,15942513	-	0,185994617	10,5913667	9,798237659	Q5	Q5

		10,40537208					
441	0,193855379	0,152134094	0,211904867	0,059770773	0,055804875	H	H
442	0,187307725	0,176615002	0,198000448	0,021385447	0,020316174	H	H
443	- 9,851418717	- 9,851418717	- 9,851418717	0	0	C	C
444	- 1,149297856	- 10,92958265	0,147091674	11,07667432	10,67770913	Q5	Q5
445	- 4,171661546	- 8,519006236	0,175683144	8,69468938	8,259954911	Q3	Q3
446	- 0,144698171	- 9,377636684	0,196040526	9,57367721	9,09499335	Q5	Q5
447	0,198571388	0,198571388	0,198571388	0	0	H	H
448	- 14,02635667	- -14,0538831	- 13,99883024	0,055052859	0,052300216	A	A
449	- 0,010222448	- 0,322260559	0,055954435	0,378214995	0,347549296	H	H
450	- 0,070672844	- -1,26416605	0,044572746	1,308738795	0,965320192	H	H
451	- 0,046488605	- 0,118762794	0,068080462	0,186843256	0,177501093	H	H
452	- 0,045085032	- 3,534870197	0,075708182	3,610578379	1,764337338	Q5	H
453	- 0,029500871	- 1,448931598	0,104993596	1,553925194	1,548512643	H	H
454	- 0,054508636	- 0,023009457	0,086007815	0,062998358	0,05984844	H	H
455	- 0,359857296	- 0,359857296	- 0,359857296	0	0	H	H
456	- 2,580488698	- 5,090380233	- 0,070597164	5,019783069	4,768793916	Q4	Q4
457	- 0,048434587	- 0,048434587	- 0,048434587	0	0	H	H
458	- 7,337060339	- 7,337060339	- 7,337060339	0	0	D	D
459	- 7,061338585	- 7,061338585	- 7,061338585	0	0	D	D

460	0,068352924	-1,57124495	0,153789346	1,725034295	0,881099182	H	H
461	0,107756114	0,846816107	0,15165386	0,998469967	0,561380153	H	H
462	0,131801539	0,101214231	0,15644168	0,055227449	0,05109047	H	H
463	0,221874664	0,221874664	0,221874664	0	0	H	H
464	0,154978937	0,110100174	0,159092919	0,048992744	0,046551377	H	H
465	0,13665694	0,13665694	0,13665694	0	0	H	H
466	0,156038368	0,129272545	0,156038368	0,026765823	0,025427532	H	H
467	1,835757298	8,370574611	0,104895371	8,265679239	7,645753297	Q5	Q5
468	0,138608535	0,137951165	0,139265904	0,001314739	0,001249002	H	H
469	0,157612569	0,151407417	0,16012226	0,008714843	0,008094407	H	H
470	0,072984528	0,872630982	0,132121034	1,004752016	0,923165458	H	H
471	0,146637108	0,393920263	0,167362048	0,561282311	0,215534994	H	H
472	0,143430056	0,113783233	0,163250911	0,049467678	0,045409125	H	H
473	0,146096888	0,146096888	0,146096888	0	0	H	H
474	0,157745554	8,459376235	0,16121218	8,620588415	8,189558994	Q5	Q5
475	0,148838819	0,137621721	0,179234692	0,041612972	0,034359158	H	H
476	0,153787085	0,13379047	0,178224504	0,044434034	0,042212332	H	H
477	4,784955055	4,784955055	4,784955055	0	0	F	F
478	0,169370741	0,169370741	0,169370741	0	0	H	H
479	0,166746541	0,166746541	0,166746541	0	0	H	H
480	10,08868606	10,08868606	10,08868606	0	0	B	B
481	8,831039145	12,32497262	0,040791181	12,28418144	11,66997237	Q1	Q1
482	0,040620789	0,005223691	0,156134744	0,161358436	0,15899681	H	H

483	- 10,58424023	- 12,21089621	- 8,957584248	3,253311962	3,090646364	Q1	Q1
484	- 12,91014346	- 12,91014346	- 12,91014346	0	0	A	A
485	- 11,55906442	- 11,55906442	- 11,55906442	0	0	B	B
486	- 10,75385301	- 10,75385301	- 10,75385301	0	0	B	B
487	- 0,070739915	- 0,203805779	- 0,027273407	0,231079186	0,225972054	H	H
488	- 0,032959604	- -0,56378559	- 0,006235837	0,570021428	0,463862004	H	H
489	- 2,515182566	- 2,515182566	- 2,515182566	0	0	G	G
490	- 2,785375986	- 2,785375986	- 2,785375986	0	0	G	G
491	- 0,018663021	- 4,335062167	- 0,073843622	4,408905789	1,163656568	Q5	H
492	- 0,011947856	- 2,404351836	- 0,082507312	2,486859148	2,404263394	Q5	Q5
493	- 3,664560379	- 4,890385204	- 2,438735553	2,451649651	2,329067168	Q4	Q4
494	- 0,033822155	- 9,047596688	- 0,138710306	9,186306994	2,290821609	Q5	Q5
495	- 0,099581291	- 5,537077175	- 0,126304921	5,663382097	2,872802328	Q5	Q5
496	- 0,103349028	- 0,034270273	- 0,117638757	0,15190903	0,138258844	H	H
497	- 0,112057455	- 0,093323745	- 0,130791165	0,03746742	0,035594049	H	H
498	- 7,137463556	- 7,137463556	- 7,137463556	0	0	D	D
499	- 0,728052489	- 1,578348965	- 0,122243987	1,700592952	1,615563304	H	H
500	- 0,103310155	- 8,768563702	- 0,162678702	8,931242404	4,520244649	Q5	Q5

501	0,139983437	0,109378409	0,153851718	0,04447331	0,042287939	H	H
502	0,100675481	8,005507128	0,145597495	8,151104623	8,148988868	Q5	Q5
503	0,119998206	8,506434191	0,159980381	8,666414573	8,233093844	Q5	Q5
504	0,130117699	0,130117699	0,130117699	0	0	H	H
505	-7,7926873	9,550939109	0,312739185	9,238199924	9,131809916	Q2	Q2
506	1,063290023	1,063290023	1,063290023	0	0	H	H
507	11,49515926	-11,5987159	11,39160261	0,207113295	0,19675763	B	B
508	0,114539964	0,114539964	0,114539964	0	0	H	H
509	11,47395264	11,47395264	11,47395264	0	0	B	B
510	0,271628235	0,271628235	0,271628235	0	0	H	H
511	1,120003206	1,233173907	1,006832505	0,226341403	0,215024332	H	H
512	-0,39979579	-0,39979579	-0,39979579	0	0	H	H
513	4,012501121	4,012501121	4,012501121	0	0	F	F
514	5,631867093	5,631867093	5,631867093	0	0	E	E
515	0,312766323	0,312766323	0,312766323	0	0	H	H
516	3,816075614	4,917222573	0,209085077	5,12630765	5,065133194	Q4	Q4
517	7,461709087	7,465011221	7,458406953	0,006604268	0,006274055	D	D
518	5,937923354	6,894393194	4,941579628	1,952813566	1,770584235	E	E
519	8,059628488	8,152654668	7,966602308	0,186052359	0,176749741	C	C
383a	8,741528083	8,741528083	8,741528083	0	0	C	C
387a	-	-	-	0	0	C	C



	9,989327159	9,989327159	9,989327159				
--	-------------	-------------	-------------	--	--	--	--

### B.10. Median, minimum, maximum and spread values for the 13 groups for true solution Zn

Tableau B.21 CF results (log CF) for true solution Zn for the 13 groups

Groupe	Median	Minimum	Maximum	Spread
A	-13,5552478	-14,0538831	-12,9101435	1,14373964
B	-11,44195	-11,9170885	-10,0886861	1,82840242
C	-8,72880422	-9,98932716	-7,96660231	2,02272485
D	-7,34522449	-7,83744606	-6,79725464	1,04019142
E	-5,75316888	-6,89439319	-4,94157963	1,95281357
F	-4,68921947	-5,62332428	-3,56578132	2,05754296
G	-2,76663954	-3,78778781	-1,76455601	2,0232318
H	0,18386174	-1,7569888	0,31276632	2,06975512
Q1	-9,70763969	-12,3249726	-0,04079118	12,2841814
Q2	-6,59367704	-13,1053139	0,21755184	13,3228657
Q3	-4,48939063	-12,0161953	0,25526586	12,2714611
Q4	-3,50192148	-7,18624998	0,22533876	7,41158874
Q5	0,10199282	-12,4593804	0,27074802	12,7301284

Tableau B.22 CF results (log CF) for true solution Zn for the 13 groups with a 95% confidence interval

Group	Median	Minimum	Maximum	Spread
A	-13,5552478	-14,0263567	-12,9101435	1,11621321
B	-11,44195	-11,9170885	-10,0886861	1,82840242
C	-8,72880422	-9,98932716	-8,05962849	1,92969867
D	-7,34522449	-7,83744606	-6,82152039	1,01592567
E	-5,75316888	-6,66821974	-5,23271763	1,43550211
F	-4,68921947	-4,90010336	-3,56578132	1,33432204
G	-2,76663954	-3,44595292	-1,76455601	1,68139691
H	0,18232885	-1,44902416	0,31276632	1,76179048
Q1	-9,70763969	-12,3249726	-0,04079118	12,2841814
Q2	-6,59367704	-13,1053139	0,21755184	13,3228657
Q3	-4,48939063	-12,0161953	0,25526586	12,2714611
Q4	-3,50192148	-7,18624998	0,22533876	7,41158874
Q5	0,10067548	-12,4593804	0,27074802	12,7301284

## ANNEXE C – SUPPORTING INFORMATION POUR LE TROISIÈME MANUSCRIT

In the tables below the ranking of the 263 substances that contribute the most to terrestrial ecotoxicity impact score are presented for the various selected scenarios.

Tableau C.23 Ranking and contribution (PDF.m<sup>2</sup>.yr) of the 263 substances that contribute the most to terrestrial ecotoxicity impact score for the IMPACT\_2002 and USEtox\_mod scenarios

No	IMPACT_2002			USEtox_mod		
1	Aluminium	Soil	6,15E+08	<b>Zinc</b>	<b>Soil</b>	<b>9,64E+08</b>
2	<b>Zinc</b>	<b>Soil</b>	<b>4,22E+08</b>	Aluminium	Soil	6,15E+08
3	Aluminium	Air	2,78E+08	Aluminium	Air	2,78E+08
4	Copper	Air	8,22E+07	Copper	Air	8,22E+07
5	Zinc	Air	8,22E+07	Zinc	Air	8,22E+07
6	Copper	Soil	3,00E+07	Copper	Soil	3,00E+07
7	Chromium	Air	2,61E+07	Chromium	Air	2,61E+07
8	Nickel	Air	2,56E+07	Nickel	Air	2,56E+07
9	Chromium	Soil	1,64E+07	Chromium	Soil	1,64E+07
10	Arsenic	Air	1,01E+07	Arsenic	Air	1,01E+07
11	Lead	Air	8,50E+06	Lead	Air	8,50E+06
12	Nickel	Soil	7,24E+06	Nickel	Soil	7,24E+06
13	Cadmium	Air	6,21E+06	Cadmium	Air	6,21E+06
14	Aldicarb	Soil	4,04E+06	Aldicarb	Soil	4,04E+06
15	Cadmium	Soil	3,04E+06	Cadmium	Soil	3,04E+06
16	Mercury	Air	2,93E+06	Mercury	Air	2,93E+06
17	Lead	Soil	2,04E+06	Lead	Soil	2,04E+06
18	Arsenic	Soil	1,70E+06	Arsenic	Soil	1,70E+06
19	Chromium VI	Soil	1,30E+06	Chromium VI	Soil	1,30E+06
20	Chromium VI	Air	8,90E+05	Chromium VI	Air	8,90E+05
21	Cobalt	Soil	8,61E+05	Cobalt	Soil	8,61E+05
22	Cobalt	Air	5,25E+05	Cobalt	Air	5,25E+05
23	Metamitron	Soil	1,39E+05	Metamitron	Soil	1,39E+05
24	Glyphosate	Soil	1,02E+05	Glyphosate	Soil	1,02E+05
25	Fipronil	Soil	8,98E+04	Fipronil	Soil	8,98E+04
26	Aldrin	Soil	5,85E+04	Aldrin	Soil	5,85E+04
27	Antimony	Air	5,60E+04	Antimony	Air	5,60E+04
28	Ammonia	Air	4,03E+04	Ammonia	Air	4,03E+04
29	Selenium	Air	3,83E+04	Selenium	Air	3,83E+04
30	Dicofol	Soil	2,59E+04	Dicofol	Soil	2,59E+04
31	Diuron	Soil	2,55E+04	Diuron	Soil	2,55E+04

32	Phenol, pentachloro-	Soil	2,33E+04	Phenol, pentachloro-	Soil	2,33E+04
33	Barium	Soil	1,50E+04	Barium	Soil	1,50E+04
34	Chlorothalonil	Soil	1,28E+04	Chlorothalonil	Soil	1,28E+04
35	Chlorpyrifos	Soil	9,21E+03	Chlorpyrifos	Soil	9,21E+03
36	Barium	Air	3,61E+03	Barium	Air	3,61E+03
37	Ethofumesate	Soil	2,76E+03	Ethofumesate	Soil	2,76E+03
38	Paraquat	Soil	2,69E+03	Paraquat	Soil	2,69E+03
39	Ethephon	Soil	2,59E+03	Ethephon	Soil	2,59E+03
40	Mancozeb	Soil	2,40E+03	Mancozeb	Soil	2,40E+03
41	Acephate	Soil	1,89E+03	Acephate	Soil	1,89E+03
42	Cypermethrin	Soil	1,74E+03	Cypermethrin	Soil	1,74E+03
43	Carbofuran	Soil	1,22E+03	Carbofuran	Soil	1,22E+03
44	Metolachlor	Soil	1,14E+03	Metolachlor	Soil	1,14E+03
45	Carbendazim	Soil	9,99E+02	Carbendazim	Soil	9,99E+02
46	Hydrocarbons, aromatic	Air	6,75E+02	Hydrocarbons, aromatic	Air	6,75E+02
47	Mepiquat chloride	Soil	6,33E+02	Mepiquat chloride	Soil	6,33E+02
48	Prometryn	Soil	4,97E+02	Prometryn	Soil	4,97E+02
49	Atrazine	Soil	4,02E+02	Atrazine	Soil	4,02E+02
50	Acetic acid	Air	3,69E+02	Acetic acid	Air	3,69E+02
51	Formaldehyde	Air	2,87E+02	Formaldehyde	Air	2,87E+02
52	Isoproturon	Soil	2,65E+02	Isoproturon	Soil	2,65E+02
53	Linuron	Soil	1,96E+02	Linuron	Soil	1,96E+02
54	Metribuzin	Soil	1,80E+02	Metribuzin	Soil	1,80E+02
55	Carbetamide	Soil	1,40E+02	Carbetamide	Soil	1,40E+02
56	Thiram	Soil	1,36E+02	Thiram	Soil	1,36E+02
57	Pyrithiobac sodium salt	Soil	7,80E+01	Pyrithiobac sodium salt	Soil	7,80E+01
58	Dimethoate	Soil	7,79E+01	Dimethoate	Soil	7,79E+01
59	Phenol, pentachloro-	Air	7,50E+01	Phenol, pentachloro-	Air	7,50E+01
60	Thidiazuron	Soil	5,51E+01	Thidiazuron	Soil	5,51E+01
61	Acrolein	Air	4,77E+01	Acrolein	Air	4,77E+01
62	Trifluralin	Soil	4,69E+01	Trifluralin	Soil	4,69E+01
63	Methane, tetrafluoro-, CFC-14	Air	4,52E+01	Methane, tetrafluoro-, CFC-14	Air	4,52E+01
64	Benzo(a)pyrene	Air	4,42E+01	Benzo(a)pyrene	Air	4,42E+01
65	Cyfluthrin	Soil	4,30E+01	Cyfluthrin	Soil	4,30E+01
66	Sulfentrazone	Soil	4,19E+01	Sulfentrazone	Soil	4,19E+01
67	Antimony	Soil	2,84E+01	Antimony	Soil	2,84E+01
68	Selenium	Soil	2,82E+01	Selenium	Soil	2,82E+01
69	Lambda-cyhalothrin	Soil	2,67E+01	Lambda-cyhalothrin	Soil	2,67E+01
70	Endosulfan	Soil	2,58E+01	Endosulfan	Soil	2,58E+01
71	Pendimethalin	Soil	2,50E+01	Pendimethalin	Soil	2,50E+01

72	Acetochlor	Soil	2,34E+01	Acetochlor	Soil	2,34E+01
73	PAH, polycyclic aromatic hydrocarbons	Air	2,21E+01	PAH, polycyclic aromatic hydrocarbons	Air	2,21E+01
74	Parathion	Soil	1,90E+01	Parathion	Soil	1,90E+01
75	2,4-D	Soil	1,70E+01	2,4-D	Soil	1,70E+01
76	Dimethenamid	Soil	1,46E+01	Dimethenamid	Soil	1,46E+01
77	Phenol	Air	8,65E+00	Phenol	Air	8,65E+00
78	Clomazone	Soil	5,32E+00	Clomazone	Soil	5,32E+00
79	Ethane, 1,2-dichloro-	Air	4,49E+00	Ethane, 1,2-dichloro-	Air	4,49E+00
80	Ethane, 1,1,1,2-tetrafluoro-, HFC-134a	Air	4,09E+00	Ethane, 1,1,1,2-tetrafluoro-, HFC-134a	Air	4,09E+00
81	Benzene, 1,2-dichloro-	Water	3,76E+00	Benzene, 1,2-dichloro-	Water	3,76E+00
82	Hydrocarbons, C10-C50, non aromatic	Water	3,61E+00	Hydrocarbons, C10-C50, non aromatic	Water	3,61E+00
83	Ethyl acetate	Air	3,56E+00	Ethyl acetate	Air	3,56E+00
84	Glyphosate	Air	3,39E+00	Glyphosate	Air	3,39E+00
85	Benzene, chloro-	Water	3,03E+00	Benzene, chloro-	Water	3,03E+00
86	Tebuconazole	Soil	2,99E+00	Tebuconazole	Soil	2,99E+00
87	Methyl ethyl ketone	Air	2,84E+00	Methyl ethyl ketone	Air	2,84E+00
88	Iprodione	Soil	2,69E+00	Iprodione	Soil	2,69E+00
89	Propane	Air	2,60E+00	Propane	Air	2,60E+00
90	Benzene	Air	2,25E+00	Benzene	Air	2,25E+00
91	Methanol	Air	1,51E+00	Methanol	Air	1,51E+00
92	Acetaldehyde	Air	1,40E+00	Acetaldehyde	Air	1,40E+00
93	Simazine	Soil	1,24E+00	Simazine	Soil	1,24E+00
94	Imazamox	Soil	1,24E+00	Imazamox	Soil	1,24E+00
95	Butane	Air	1,21E+00	Butane	Air	1,21E+00
96	Isoxaflutole	Soil	1,16E+00	Isoxaflutole	Soil	1,16E+00
97	Ethane, 1,1,2-trichloro-1,2,2-trifluoro-, CFC-113	Air	1,07E+00	Ethane, 1,1,2-trichloro-1,2,2-trifluoro-, CFC-113	Air	1,07E+00
98	Napropamide	Soil	9,55E-01	Napropamide	Soil	9,55E-01
99	Malathion	Soil	9,15E-01	Malathion	Soil	9,15E-01
100	Carbaryl	Soil	8,92E-01	Carbaryl	Soil	8,92E-01
101	Tribufos	Soil	8,84E-01	Tribufos	Soil	8,84E-01
102	Rimsulfuron	Soil	8,72E-01	Rimsulfuron	Soil	8,72E-01
103	Alachlor	Soil	7,97E-01	Alachlor	Soil	7,97E-01
104	Ethene	Air	7,85E-01	Ethene	Air	7,85E-01
105	Toluene	Air	7,66E-01	Toluene	Air	7,66E-01
106	Azoxystrobin	Soil	6,53E-01	Azoxystrobin	Soil	6,53E-01
107	Pentane	Air	6,52E-01	Pentane	Air	6,52E-01
108	Terbufos	Soil	6,35E-01	Terbufos	Soil	6,35E-01

109	Acetone	Air	5,78E-01	Acetone	Air	5,78E-01
110	Benomyl	Soil	5,60E-01	Benomyl	Soil	5,60E-01
111	Vinclozolin	Soil	4,10E-01	Vinclozolin	Soil	4,10E-01
112	Chloroform	Air	3,97E-01	Chloroform	Air	3,97E-01
113	Methane, chlorodifluoro-, HCFC-22	Air	2,98E-01	Methane, chlorodifluoro-, HCFC-22	Air	2,98E-01
114	Pirimicarb	Soil	2,87E-01	Pirimicarb	Soil	2,87E-01
115	Trinexapac-ethyl	Soil	2,59E-01	Trinexapac-ethyl	Soil	2,59E-01
116	Dicamba	Soil	2,58E-01	Dicamba	Soil	2,58E-01
117	Hydrocarbons, aromatic	Water	2,42E-01	Hydrocarbons, aromatic	Water	2,42E-01
118	Metribuzin	Air	2,11E-01	Metribuzin	Air	2,11E-01
119	Flumetsulam	Soil	1,89E-01	Flumetsulam	Soil	1,89E-01
120	Methane, dichloro-, HCC-30	Air	1,76E-01	Methane, dichloro-, HCC-30	Air	1,76E-01
121	m-Xylene	Air	1,60E-01	m-Xylene	Air	1,60E-01
122	Ethalfuralin	Soil	1,57E-01	Ethalfuralin	Soil	1,57E-01
123	Xylene	Air	1,51E-01	Xylene	Air	1,51E-01
124	Flufenacet	Soil	1,31E-01	Flufenacet	Soil	1,31E-01
125	Ioxynil	Soil	1,31E-01	Ioxynil	Soil	1,31E-01
126	Ethyne	Air	1,31E-01	Ethyne	Air	1,31E-01
127	Oxydemeton methyl	Soil	1,25E-01	Oxydemeton methyl	Soil	1,25E-01
128	Ethane, 1,2-dichloro-	Water	1,25E-01	Ethane, 1,2-dichloro-	Water	1,25E-01
129	Sulfentrazone	Air	1,13E-01	Sulfentrazone	Air	1,13E-01
130	Methane, dichlorodifluoro-, CFC-12	Air	1,10E-01	Methane, dichlorodifluoro-, CFC-12	Air	1,10E-01
131	Methane, bromotrifluoro-, Halon 1301	Air	1,03E-01	Methane, bromotrifluoro-, Halon 1301	Air	1,03E-01
132	Thifensulfuron-methyl	Soil	1,02E-01	Thifensulfuron-methyl	Soil	1,02E-01
133	Difenoconazole	Soil	9,74E-02	Difenoconazole	Soil	9,74E-02
134	Metolachlor	Air	9,54E-02	Metolachlor	Air	9,54E-02
135	Paraquat	Air	9,40E-02	Paraquat	Air	9,40E-02
136	Benzene, hexachloro-	Air	9,31E-02	Benzene, hexachloro-	Air	9,31E-02
137	Kresoxim-methyl	Soil	9,17E-02	Kresoxim-methyl	Soil	9,17E-02
138	Ethanol	Air	8,15E-02	Ethanol	Air	8,15E-02
139	Methane, dichloro-, HCC-30	Water	7,67E-02	Methane, dichloro-, HCC-30	Water	7,67E-02
140	Methane, tetrachloro-, CFC-10	Air	7,10E-02	Methane, tetrachloro-, CFC-10	Air	7,10E-02

141	Phenmedipham	Soil	6,99E-02	Phenmedipham	Soil	6,99E-02
142	Fluroxypyr	Soil	6,64E-02	Fluroxypyr	Soil	6,64E-02
143	Deltamethrin	Soil	6,49E-02	Deltamethrin	Soil	6,49E-02
144	Tefluthrin	Soil	6,44E-02	Tefluthrin	Soil	6,44E-02
145	t-Butyl methyl ether	Air	6,02E-02	t-Butyl methyl ether	Air	6,02E-02
146	Endothall	Soil	4,59E-02	Endothall	Soil	4,59E-02
147	Ethene, chloro-	Air	4,35E-02	Ethene, chloro-	Air	4,35E-02
148	Bromoxynil	Soil	4,20E-02	Bromoxynil	Soil	4,20E-02
149	Benzene, ethyl-	Air	3,75E-02	Benzene, ethyl-	Air	3,75E-02
150	Cyprodinil	Soil	3,47E-02	Cyprodinil	Soil	3,47E-02
151	Propiconazole	Soil	3,20E-02	Propiconazole	Soil	3,20E-02
152	Ethane, 1,1,1-trichloro-, HCFC-140	Air	2,94E-02	Ethane, 1,1,1-trichloro-, HCFC-140	Air	2,94E-02
153	Imazethapyr	Soil	2,88E-02	Imazethapyr	Soil	2,88E-02
154	Prochloraz	Soil	2,57E-02	Prochloraz	Soil	2,57E-02
155	Quizalofop ethyl ester	Soil	2,14E-02	Quizalofop ethyl ester	Soil	2,14E-02
156	Cyproconazole	Soil	2,13E-02	Cyproconazole	Soil	2,13E-02
157	Benzene	Water	1,95E-02	Benzene	Water	1,95E-02
158	Sethoxydim	Soil	1,94E-02	Sethoxydim	Soil	1,94E-02
159	Metalaxil	Soil	1,90E-02	Metalaxil	Soil	1,90E-02
160	Fenbuconazole	Soil	1,80E-02	Fenbuconazole	Soil	1,80E-02
161	Bifenthrin	Soil	1,64E-02	Bifenthrin	Soil	1,64E-02
162	Bentazone	Soil	1,58E-02	Bentazone	Soil	1,58E-02
163	Carbaryl	Air	1,43E-02	Carbaryl	Air	1,43E-02
164	Chloroform	Water	1,30E-02	Chloroform	Water	1,30E-02
165	Ethene, tetrachloro-	Air	1,27E-02	Ethene, tetrachloro-	Air	1,27E-02
166	Toluene	Water	1,26E-02	Toluene	Water	1,26E-02
167	Chlorpyrifos	Air	1,19E-02	Chlorpyrifos	Air	1,19E-02
168	Formaldehyde	Water	9,28E-03	Formaldehyde	Water	9,28E-03
169	Atrazine	Air	9,24E-03	Atrazine	Air	9,24E-03
170	Propene	Air	8,71E-03	Propene	Air	8,71E-03
171	Ethane, 1,1-difluoro-, HFC-152a	Air	8,70E-03	Ethane, 1,1-difluoro-, HFC-152a	Air	8,70E-03
172	Hydrazine	Water	8,64E-03	Hydrazine	Water	8,64E-03
173	Benzene, 1,2-dichloro-	Air	7,74E-03	Benzene, 1,2-dichloro-	Air	7,74E-03
174	Triadimenol	Soil	6,56E-03	Triadimenol	Soil	6,56E-03
175	PAH, polycyclic aromatic hydrocarbons	Water	6,55E-03	PAH, polycyclic aromatic hydrocarbons	Water	6,55E-03
176	Methane, bromochlorodifluoro-, Halon 1211	Air	6,16E-03	Methane, bromochlorodifluoro-, Halon 1211	Air	6,16E-03
177	Chloridazon	Soil	6,16E-03	Chloridazon	Soil	6,16E-03

178	Acetaldehyde	Water	5,59E-03	Acetaldehyde	Water	5,59E-03
179	Thiodicarb	Soil	5,30E-03	Thiodicarb	Soil	5,30E-03
180	Dioxin, 2,3,7,8 Tetrachlorodibenzo-p-	Air	5,20E-03	Dioxin, 2,3,7,8 Tetrachlorodibenzo-p-	Air	5,20E-03
181	Polychlorinated biphenyls	Air	4,56E-03	Polychlorinated biphenyls	Air	4,56E-03
182	2,4-D	Air	4,50E-03	2,4-D	Air	4,50E-03
183	2-Methyl-4-chlorophenoxyacetic acid	Soil	4,30E-03	2-Methyl-4-chlorophenoxyacetic acid	Soil	4,30E-03
184	Phenol	Water	4,25E-03	Phenol	Water	4,25E-03
185	Azoxystrobin	Air	3,73E-03	Azoxystrobin	Air	3,73E-03
186	Diclofop-methyl	Soil	3,51E-03	Diclofop-methyl	Soil	3,51E-03
187	Parathion, methyl	Air	3,07E-03	Parathion, methyl	Air	3,07E-03
188	Benzene, pentachloro-	Air	2,98E-03	Benzene, pentachloro-	Air	2,98E-03
189	Cyhalothrin, gamma-	Soil	2,91E-03	Cyhalothrin, gamma-	Soil	2,91E-03
190	PAH, polycyclic aromatic hydrocarbons	Soil	2,85E-03	PAH, polycyclic aromatic hydrocarbons	Soil	2,85E-03
191	Ethene	Water	2,75E-03	Ethene	Water	2,75E-03
192	Butene	Air	2,75E-03	Butene	Air	2,75E-03
193	Imazamox	Air	2,74E-03	Imazamox	Air	2,74E-03
194	Cyhalothrin, gamma-	Air	2,69E-03	Cyhalothrin, gamma-	Air	2,69E-03
195	Parathion, methyl	Soil	2,58E-03	Parathion, methyl	Soil	2,58E-03
196	Ethane, 2-chloro-1,1,1,2-tetrafluoro-, HCFC-124	Air	2,39E-03	Ethane, 2-chloro-1,1,1,2-tetrafluoro-, HCFC-124	Air	2,39E-03
197	Thiodicarb	Air	2,34E-03	Thiodicarb	Air	2,34E-03
198	Acephate	Air	2,24E-03	Acephate	Air	2,24E-03
199	Alachlor	Air	2,20E-03	Alachlor	Air	2,20E-03
200	Permethrin	Soil	2,11E-03	Permethrin	Soil	2,11E-03
201	Prosulfuron	Soil	1,98E-03	Prosulfuron	Soil	1,98E-03
202	Xylene	Water	1,92E-03	Xylene	Water	1,92E-03
203	Bifenox	Soil	1,80E-03	Bifenox	Soil	1,80E-03
204	Imazapyr	Soil	1,77E-03	Imazapyr	Soil	1,77E-03
205	Hexane	Air	1,68E-03	Hexane	Air	1,68E-03
206	Benzene, ethyl-	Water	1,43E-03	Benzene, ethyl-	Water	1,43E-03
207	Flufenacet	Air	1,38E-03	Flufenacet	Air	1,38E-03
208	Trifluralin	Air	1,31E-03	Trifluralin	Air	1,31E-03
209	o-Xylene	Air	1,16E-03	o-Xylene	Air	1,16E-03
210	Propanal	Air	1,15E-03	Propanal	Air	1,15E-03
211	Fludioxonil	Soil	9,69E-04	Fludioxonil	Soil	9,69E-04
212	Methanol	Water	9,23E-04	Methanol	Water	9,23E-04

213	Cypermethrin	Air	8,45E-04	Cypermethrin	Air	8,45E-04
214	Pendimethalin	Air	7,68E-04	Pendimethalin	Air	7,68E-04
215	Methane, trichlorofluoro-, CFC-11	Air	7,56E-04	Methane, trichlorofluoro-, CFC-11	Air	7,56E-04
216	Acenaphthene	Air	7,37E-04	Acenaphthene	Air	7,37E-04
217	Ethanol	Water	5,68E-04	Ethanol	Water	5,68E-04
218	Propene	Water	5,37E-04	Propene	Water	5,37E-04
219	Flumetsulam	Air	4,72E-04	Flumetsulam	Air	4,72E-04
220	Styrene	Air	3,87E-04	Styrene	Air	3,87E-04
221	m-Xylene	Water	2,94E-04	m-Xylene	Water	2,94E-04
222	t-Butyl methyl ether	Water	2,46E-04	t-Butyl methyl ether	Water	2,46E-04
223	Dicamba	Air	2,32E-04	Dicamba	Air	2,32E-04
224	Acetic acid	Water	2,24E-04	Acetic acid	Water	2,24E-04
225	Dimethylamine	Water	2,02E-04	Dimethylamine	Water	2,02E-04
226	o-Xylene	Water	1,99E-04	o-Xylene	Water	1,99E-04
227	Cyfluthrin	Air	1,97E-04	Cyfluthrin	Air	1,97E-04
228	Imazethapyr	Air	1,91E-04	Imazethapyr	Air	1,91E-04
229	Propiconazole	Air	1,78E-04	Propiconazole	Air	1,78E-04
230	Ethyl acetate	Water	1,38E-04	Ethyl acetate	Water	1,38E-04
231	Butene	Water	1,22E-04	Butene	Water	1,22E-04
232	Ethene, chloro-	Water	1,18E-04	Ethene, chloro-	Water	1,18E-04
233	Fenoxaprop ethyl ester	Soil	1,14E-04	Fenoxaprop ethyl ester	Soil	1,14E-04
234	Bentazone	Air	1,12E-04	Bentazone	Air	1,12E-04
235	Triasulfuron	Soil	1,11E-04	Triasulfuron	Soil	1,11E-04
236	Sulfosulfuron	Soil	1,10E-04	Sulfosulfuron	Soil	1,10E-04
237	Butadiene	Air	6,13E-05	Butadiene	Air	6,13E-05
238	Methane, dichlorofluoro-, HCFC-21	Air	6,08E-05	Methane, dichlorofluoro-, HCFC-21	Air	6,08E-05
239	Permethrin	Air	5,13E-05	Permethrin	Air	5,13E-05
240	Acenaphthene	Water	4,07E-05	Acenaphthene	Water	4,07E-05
241	Acetone	Water	3,84E-05	Acetone	Water	3,84E-05
242	Heptane	Air	2,66E-05	Heptane	Air	2,66E-05
243	Methane, bromo-, Halon 1001	Air	2,42E-05	Methane, bromo-, Halon 1001	Air	2,42E-05
244	Quizalofop ethyl ester	Air	1,63E-05	Quizalofop ethyl ester	Air	1,63E-05
245	Bromuconazole	Soil	1,39E-05	Bromuconazole	Soil	1,39E-05
246	Aluminium	Water	9,38E-06	Aluminium	Water	9,38E-06
247	Mecoprop	Soil	6,00E-06	Mecoprop	Soil	6,00E-06
248	Chlorsulfuron	Soil	5,20E-06	Chlorsulfuron	Soil	5,20E-06
249	Propanal	Water	4,38E-06	Propanal	Water	4,38E-06
250	Sethoxydim	Air	1,86E-06	Sethoxydim	Air	1,86E-06



251	Triallate	Soil	5,24E-07	Triallate	Soil	5,24E-07
252	Barium	Water	1,46E-07	Barium	Water	1,46E-07
253	Flumiclorac-pentyl	Soil	7,27E-08	Flumiclorac-pentyl	Soil	7,27E-08
254	Flumiclorac-pentyl	Air	6,05E-08	Flumiclorac-pentyl	Air	6,05E-08
255	Asulam	Soil	5,14E-08	Asulam	Soil	5,14E-08
256	Acenaphthylene	Water	7,95E-09	Acenaphthylene	Water	7,95E-09
257	Mercury	Water	3,14E-09	Mercury	Water	3,14E-09
258	Antimony	Water	2,89E-09	Antimony	Water	2,89E-09
259	Ethane, 1,1,1-trichloro-, HCFC-140	Water	8,22E-10	Ethane, 1,1,1-trichloro-, HCFC-140	Water	8,22E-10
260	Cadmium	Water	6,29E-10	Cadmium	Water	6,29E-10
261	Cobalt	Water	1,49E-10	Cobalt	Water	1,49E-10
262	Triethylene glycol	Water	3,12E-12	Triethylene glycol	Water	3,12E-12
263	Mercury	Soil	-2,49E+05	Mercury	Soil	-2,49E+05

Tableau C.24 Ranking and contribution (PDF.m<sup>2</sup>.yr) of the 263 substances that contribute the most to terrestrial ecotoxicity impact score for the generic\_Sol and generic\_TS scenarios

No	generic_Sol			generic_TS		
1	Aluminium	Soil	6,15E+08	Aluminium	Soil	6,15E+08
2	Aluminium	Air	2,78E+08	Aluminium	Air	2,78E+08
3	Copper	Air	8,22E+07	Copper	Air	8,22E+07
4	Zinc	Air	8,22E+07	Zinc	Air	8,22E+07
5	Copper	Soil	3,00E+07	Copper	Soil	3,00E+07
6	Chromium	Air	2,61E+07	Chromium	Air	2,61E+07
7	Nickel	Air	2,56E+07	Nickel	Air	2,56E+07
8	Chromium	Soil	1,64E+07	Chromium	Soil	1,64E+07
9	<b>Zinc</b>	<b>Soil</b>	<b>1,55E+07</b>	Arsenic	Air	1,01E+07
10	Arsenic	Air	1,01E+07	Lead	Air	8,50E+06
11	Lead	Air	8,50E+06	Nickel	Soil	7,24E+06
12	Nickel	Soil	7,24E+06	Cadmium	Air	6,21E+06
13	Cadmium	Air	6,21E+06	<b>Zinc</b>	<b>Soil</b>	<b>4,78E+06</b>
14	Aldicarb	Soil	4,04E+06	Aldicarb	Soil	4,04E+06
15	Cadmium	Soil	3,04E+06	Cadmium	Soil	3,04E+06
16	Mercury	Air	2,93E+06	Mercury	Air	2,93E+06
17	Lead	Soil	2,04E+06	Lead	Soil	2,04E+06
18	Arsenic	Soil	1,70E+06	Arsenic	Soil	1,70E+06
19	Chromium VI	Soil	1,30E+06	Chromium VI	Soil	1,30E+06
20	Chromium VI	Air	8,90E+05	Chromium VI	Air	8,90E+05
21	Cobalt	Soil	8,61E+05	Cobalt	Soil	8,61E+05
22	Cobalt	Air	5,25E+05	Cobalt	Air	5,25E+05

23	Metamitron	Soil	1,39E+05	Metamitron	Soil	1,39E+05
24	Glyphosate	Soil	1,02E+05	Glyphosate	Soil	1,02E+05
25	Fipronil	Soil	8,98E+04	Fipronil	Soil	89805
26	Aldrin	Soil	5,85E+04	Aldrin	Soil	58470
27	Antimony	Air	5,60E+04	Antimony	Air	56003
28	Ammonia	Air	4,03E+04	Ammonia	Air	40344
29	Selenium	Air	3,83E+04	Selenium	Air	38298
30	Diclotophos	Soil	2,59E+04	Diclotophos	Soil	25895
31	Diuron	Soil	2,55E+04	Diuron	Soil	25475
32	Phenol, pentachloro-	Soil	2,33E+04	Phenol, pentachloro-	Soil	23295
33	Barium	Soil	1,50E+04	Barium	Soil	14964
34	Chlorothalonil	Soil	1,28E+04	Chlorothalonil	Soil	12791
35	Chlorpyrifos	Soil	9,21E+03	Chlorpyrifos	Soil	9212,3
36	Barium	Air	3,61E+03	Barium	Air	3608,5
37	Ethofumesate	Soil	2,76E+03	Ethofumesate	Soil	2756,4
38	Paraquat	Soil	2,69E+03	Paraquat	Soil	2688,4
39	Ethephon	Soil	2,59E+03	Ethephon	Soil	2590,8
40	Mancozeb	Soil	2,40E+03	Mancozeb	Soil	2401
41	Acephate	Soil	1,89E+03	Acephate	Soil	1891,3
42	Cypermethrin	Soil	1,74E+03	Cypermethrin	Soil	1741,3
43	Carbofuran	Soil	1,22E+03	Carbofuran	Soil	1222,7
44	Metolachlor	Soil	1,14E+03	Metolachlor	Soil	1136,2
45	Carbendazim	Soil	9,99E+02	Carbendazim	Soil	999,29
46	Hydrocarbons, aromatic	Air	6,75E+02	Hydrocarbons, aromatic	Air	674,97
47	Mepiquat chloride	Soil	6,33E+02	Mepiquat chloride	Soil	633,23
48	Prometryn	Soil	4,97E+02	Prometryn	Soil	497,19
49	Atrazine	Soil	4,02E+02	Atrazine	Soil	402,31
50	Acetic acid	Air	3,69E+02	Acetic acid	Air	369,31
51	Formaldehyde	Air	2,87E+02	Formaldehyde	Air	286,7
52	Isoproturon	Soil	2,65E+02	Isoproturon	Soil	264,53
53	Linuron	Soil	1,96E+02	Linuron	Soil	196,27
54	Metribuzin	Soil	1,80E+02	Metribuzin	Soil	179,59
55	Carbetamide	Soil	1,40E+02	Carbetamide	Soil	139,65
56	Thiram	Soil	1,36E+02	Thiram	Soil	135,98
57	Pyrithiobac sodium salt	Soil	7,80E+01	Pyrithiobac sodium salt	Soil	77,998
58	Dimethoate	Soil	7,79E+01	Dimethoate	Soil	77,921
59	Phenol, pentachloro-	Air	7,50E+01	Phenol, pentachloro-	Air	75,029
60	Thidiazuron	Soil	5,51E+01	Thidiazuron	Soil	55,07
61	Acrolein	Air	4,77E+01	Acrolein	Air	47,725
62	Trifluralin	Soil	4,69E+01	Trifluralin	Soil	46,866
63	Methane, tetrafluoro-, CFC-	Air	4,52E+01	Methane, tetrafluoro-,	Air	45,151

	14			CFC-14		
64	Benzo(a)pyrene	Air	4,42E+01	Benzo(a)pyrene	Air	44,16
65	Cyfluthrin	Soil	4,30E+01	Cyfluthrin	Soil	43,011
66	Sulfentrazone	Soil	4,19E+01	Sulfentrazone	Soil	41,901
67	Antimony	Soil	2,84E+01	Antimony	Soil	28,437
68	Selenium	Soil	2,82E+01	Selenium	Soil	28,164
69	Lambda-cyhalothrin	Soil	2,67E+01	Lambda-cyhalothrin	Soil	26,664
70	Endosulfan	Soil	2,58E+01	Endosulfan	Soil	25,76
71	Pendimethalin	Soil	2,50E+01	Pendimethalin	Soil	25,043
72	Acetochlor	Soil	2,34E+01	Acetochlor	Soil	23,36
73	PAH, polycyclic aromatic hydrocarbons	Air	2,21E+01	PAH, polycyclic aromatic hydrocarbons	Air	22,076
74	Parathion	Soil	1,90E+01	Parathion	Soil	19,047
75	2,4-D	Soil	1,70E+01	2,4-D	Soil	17,015
76	Dimethenamid	Soil	1,46E+01	Dimethenamid	Soil	14,572
77	Phenol	Air	8,65E+00	Phenol	Air	8,6508
78	Clomazone	Soil	5,32E+00	Clomazone	Soil	5,32
79	Ethane, 1,2-dichloro-	Air	4,49E+00	Ethane, 1,2-dichloro-	Air	4,4931
80	Ethane, 1,1,1,2-tetrafluoro-, HFC-134a	Air	4,09E+00	Ethane, 1,1,1,2-tetrafluoro-, HFC-134a	Air	4,0938
81	Benzene, 1,2-dichloro-	Water	3,76E+00	Benzene, 1,2-dichloro-	Water	3,7555
82	Hydrocarbons, C10-C50, non aromatic	Water	3,61E+00	Hydrocarbons, C10-C50, non aromatic	Water	3,61
83	Ethyl acetate	Air	3,56E+00	Ethyl acetate	Air	3,5559
84	Glyphosate	Air	3,39E+00	Glyphosate	Air	3,3933
85	Benzene, chloro-	Water	3,03E+00	Benzene, chloro-	Water	3,0326
86	Tebuconazole	Soil	2,99E+00	Tebuconazole	Soil	2,9851
87	Methyl ethyl ketone	Air	2,84E+00	Methyl ethyl ketone	Air	2,8382
88	Iprodione	Soil	2,69E+00	Iprodione	Soil	2,6946
89	Propane	Air	2,60E+00	Propane	Air	2,6001
90	Benzene	Air	2,25E+00	Benzene	Air	2,2495
91	Methanol	Air	1,51E+00	Methanol	Air	1,5091
92	Acetaldehyde	Air	1,40E+00	Acetaldehyde	Air	1,3988
93	Simazine	Soil	1,24E+00	Simazine	Soil	1,2431
94	Imazamox	Soil	1,24E+00	Imazamox	Soil	1,2427
95	Butane	Air	1,21E+00	Butane	Air	1,2063
96	Isoxaflutole	Soil	1,16E+00	Isoxaflutole	Soil	1,159
97	Ethane, 1,1,2-trichloro-1,2,2-trifluoro-, CFC-113	Air	1,07E+00	Ethane, 1,1,2-trichloro-1,2,2-trifluoro-, CFC-113	Air	1,0725
98	Napropamide	Soil	9,55E-01	Napropamide	Soil	0,95529
99	Malathion	Soil	9,15E-01	Malathion	Soil	0,91472

100	Carbaryl	Soil	8,92E-01	Carbaryl	Soil	0,89188
101	Tribufos	Soil	8,84E-01	Tribufos	Soil	0,88434
102	Rimsulfuron	Soil	8,72E-01	Rimsulfuron	Soil	0,87236
103	Alachlor	Soil	7,97E-01	Alachlor	Soil	0,79696
104	Ethene	Air	7,85E-01	Ethene	Air	0,78456
105	Toluene	Air	7,66E-01	Toluene	Air	0,76584
106	Azoxystrobin	Soil	6,53E-01	Azoxystrobin	Soil	0,65315
107	Pentane	Air	6,52E-01	Pentane	Air	0,65212
108	Terbufos	Soil	6,35E-01	Terbufos	Soil	0,63499
109	Acetone	Air	5,78E-01	Acetone	Air	0,57779
110	Benomyl	Soil	5,60E-01	Benomyl	Soil	0,56042
111	Vinclozolin	Soil	4,10E-01	Vinclozolin	Soil	0,40983
112	Chloroform	Air	3,97E-01	Chloroform	Air	0,39652
113	Methane, chlorodifluoro-, HCFC-22	Air	2,98E-01	Methane, chlorodifluoro-, HCFC-22	Air	0,29789
114	Pirimicarb	Soil	2,87E-01	Pirimicarb	Soil	0,28673
115	Trinexapac-ethyl	Soil	2,59E-01	Trinexapac-ethyl	Soil	0,25928
116	Dicamba	Soil	2,58E-01	Dicamba	Soil	0,25822
117	Hydrocarbons, aromatic	Water	2,42E-01	Hydrocarbons, aromatic	Water	0,24245
118	Metribuzin	Air	2,11E-01	Metribuzin	Air	0,21139
119	Flumetsulam	Soil	1,89E-01	Flumetsulam	Soil	0,18856
120	Methane, dichloro-, HCC-30	Air	1,76E-01	Methane, dichloro-, HCC-30	Air	0,17612
121	m-Xylene	Air	1,60E-01	m-Xylene	Air	0,1604
122	Ethalfuralin	Soil	1,57E-01	Ethalfuralin	Soil	0,15709
123	Xylene	Air	1,51E-01	Xylene	Air	0,15109
124	Flufenacet	Soil	1,31E-01	Flufenacet	Soil	0,13143
125	Ioxynil	Soil	1,31E-01	Ioxynil	Soil	0,13107
126	Ethyne	Air	1,31E-01	Ethyne	Air	0,13056
127	Oxydemeton methyl	Soil	1,25E-01	Oxydemeton methyl	Soil	0,12524
128	Ethane, 1,2-dichloro-	Water	1,25E-01	Ethane, 1,2-dichloro-	Water	0,12522
129	Sulfentrazone	Air	1,13E-01	Sulfentrazone	Air	0,11316
130	Methane, dichlorodifluoro-, CFC-12	Air	1,10E-01	Methane, dichlorodifluoro-, CFC-12	Air	0,11007
131	Methane, bromotrifluoro-, Halon 1301	Air	1,03E-01	Methane, bromotrifluoro-, Halon 1301	Air	0,10264
132	Thifensulfuron-methyl	Soil	1,02E-01	Thifensulfuron-methyl	Soil	0,10158
133	Difenoconazole	Soil	9,74E-02	Difenoconazole	Soil	0,09738
134	Metolachlor	Air	9,54E-02	Metolachlor	Air	0,095394

135	Paraquat	Air	9,40E-02	Paraquat	Air	0,093994
136	Benzene, hexachloro-	Air	9,31E-02	Benzene, hexachloro-	Air	0,093066
137	Kresoxim-methyl	Soil	9,17E-02	Kresoxim-methyl	Soil	0,091731
138	Ethanol	Air	8,15E-02	Ethanol	Air	0,081453
139	Methane, dichloro-, HCC-30	Water	7,67E-02	Methane, dichloro-, HCC-30	Water	0,076718
140	Methane, tetrachloro-, CFC-10	Air	7,10E-02	Methane, tetrachloro-, CFC-10	Air	0,070957
141	Phenmedipham	Soil	6,99E-02	Phenmedipham	Soil	0,069864
142	Fluroxypyr	Soil	6,64E-02	Fluroxypyr	Soil	0,066445
143	Deltamethrin	Soil	6,49E-02	Deltamethrin	Soil	0,064929
144	Tefluthrin	Soil	6,44E-02	Tefluthrin	Soil	0,064447
145	t-Butyl methyl ether	Air	6,02E-02	t-Butyl methyl ether	Air	0,060167
146	Endothall	Soil	4,59E-02	Endothall	Soil	0,045909
147	Ethene, chloro-	Air	4,35E-02	Ethene, chloro-	Air	0,043451
148	Bromoxynil	Soil	4,20E-02	Bromoxynil	Soil	0,041997
149	Benzene, ethyl-	Air	3,75E-02	Benzene, ethyl-	Air	0,0375
150	Cyprodinil	Soil	3,47E-02	Cyprodinil	Soil	0,034706
151	Propiconazole	Soil	3,20E-02	Propiconazole	Soil	0,031975
152	Ethane, 1,1,1-trichloro-, HCFC-140	Air	2,94E-02	Ethane, 1,1,1-trichloro-, HCFC-140	Air	0,029387
153	Imazethapyr	Soil	2,88E-02	Imazethapyr	Soil	0,028842
154	Prochloraz	Soil	2,57E-02	Prochloraz	Soil	0,025683
155	Quizalofop ethyl ester	Soil	2,14E-02	Quizalofop ethyl ester	Soil	0,021391
156	Cyproconazole	Soil	2,13E-02	Cyproconazole	Soil	0,021284
157	Benzene	Water	1,95E-02	Benzene	Water	0,01954
158	Sethoxydim	Soil	1,94E-02	Sethoxydim	Soil	0,019419
159	Metalaxil	Soil	1,90E-02	Metalaxil	Soil	0,018981
160	Fenbuconazole	Soil	1,80E-02	Fenbuconazole	Soil	0,017972
161	Bifenthrin	Soil	1,64E-02	Bifenthrin	Soil	0,016352
162	Bentazone	Soil	1,58E-02	Bentazone	Soil	0,015762
163	Carbaryl	Air	1,43E-02	Carbaryl	Air	0,014293
164	Chloroform	Water	1,30E-02	Chloroform	Water	0,013021
165	Ethene, tetrachloro-	Air	1,27E-02	Ethene, tetrachloro-	Air	0,012716
166	Toluene	Water	1,26E-02	Toluene	Water	0,01255
167	Chlorpyrifos	Air	1,19E-02	Chlorpyrifos	Air	0,011856
168	Formaldehyde	Water	9,28E-03	Formaldehyde	Water	0,0092801
169	Atrazine	Air	9,24E-03	Atrazine	Air	0,0092386
170	Propene	Air	8,71E-03	Propene	Air	0,0087097
171	Ethane, 1,1-difluoro-, HFC-152a	Air	8,70E-03	Ethane, 1,1-difluoro-, HFC-152a	Air	0,008697
172	Hydrazine	Water	8,64E-03	Hydrazine	Water	0,0086429

173	Benzene, 1,2-dichloro-	Air	7,74E-03	Benzene, 1,2-dichloro-	Air	0,0077367
174	Triadimenol	Soil	6,56E-03	Triadimenol	Soil	0,0065637
175	PAH, polycyclic aromatic hydrocarbons	Water	6,55E-03	PAH, polycyclic aromatic hydrocarbons	Water	0,0065509
176	Methane, bromochlorodifluoro-, Halon 1211	Air	6,16E-03	Methane, bromochlorodifluoro-, Halon 1211	Air	0,0061618
177	Chloridazon	Soil	6,16E-03	Chloridazon	Soil	0,0061591
178	Acetaldehyde	Water	5,59E-03	Acetaldehyde	Water	0,0055902
179	Thiodicarb	Soil	5,30E-03	Thiodicarb	Soil	0,0052962
180	Dioxin, 2,3,7,8 Tetrachlorodibenzo-p-	Air	5,20E-03	Dioxin, 2,3,7,8 Tetrachlorodibenzo-p-	Air	0,0052046
181	Polychlorinated biphenyls	Air	4,56E-03	Polychlorinated biphenyls	Air	0,0045565
182	2,4-D	Air	4,50E-03	2,4-D	Air	0,0044985
183	2-Methyl-4-chlorophenoxyacetic acid	Soil	4,30E-03	2-Methyl-4-chlorophenoxyacetic acid	Soil	0,004298
184	Phenol	Water	4,25E-03	Phenol	Water	0,0042476
185	Azoxystrobin	Air	3,73E-03	Azoxystrobin	Air	0,0037325
186	Diclofop-methyl	Soil	3,51E-03	Diclofop-methyl	Soil	0,0035096
187	Parathion, methyl	Air	3,07E-03	Parathion, methyl	Air	0,0030701
188	Benzene, pentachloro-	Air	2,98E-03	Benzene, pentachloro-	Air	0,0029839
189	Cyhalothrin, gamma-	Soil	2,91E-03	Cyhalothrin, gamma-	Soil	0,0029127
190	PAH, polycyclic aromatic hydrocarbons	Soil	2,85E-03	PAH, polycyclic aromatic hydrocarbons	Soil	0,0028453
191	Ethene	Water	2,75E-03	Ethene	Water	0,0027527
192	Butene	Air	2,75E-03	Butene	Air	0,002749
193	Imazamox	Air	2,74E-03	Imazamox	Air	0,0027416
194	Cyhalothrin, gamma-	Air	2,69E-03	Cyhalothrin, gamma-	Air	0,00269
195	Parathion, methyl	Soil	2,58E-03	Parathion, methyl	Soil	0,0025812
196	Ethane, 2-chloro-1,1,1,2-tetrafluoro-, HCFC-124	Air	2,39E-03	Ethane, 2-chloro-1,1,1,2-tetrafluoro-, HCFC-124	Air	0,0023887
197	Thiodicarb	Air	2,34E-03	Thiodicarb	Air	0,0023405
198	Acephate	Air	2,24E-03	Acephate	Air	0,0022391
199	Alachlor	Air	2,20E-03	Alachlor	Air	0,0021974
200	Permethrin	Soil	2,11E-03	Permethrin	Soil	0,0021055
201	Prosulfuron	Soil	1,98E-03	Prosulfuron	Soil	0,0019773
202	Xylene	Water	1,92E-03	Xylene	Water	0,0019223
203	Bifenox	Soil	1,80E-03	Bifenox	Soil	0,001795
204	Imazapyr	Soil	1,77E-03	Imazapyr	Soil	0,0017704

205	Hexane	Air	1,68E-03	Hexane	Air	0,0016787
206	Benzene, ethyl-	Water	1,43E-03	Benzene, ethyl-	Water	0,0014324
207	Flufenacet	Air	1,38E-03	Flufenacet	Air	0,0013785
208	Trifluralin	Air	1,31E-03	Trifluralin	Air	0,0013052
209	o-Xylene	Air	1,16E-03	o-Xylene	Air	0,0011573
210	Propanal	Air	1,15E-03	Propanal	Air	0,0011503
211	Fludioxonil	Soil	9,69E-04	Fludioxonil	Soil	0,00096864
212	Methanol	Water	9,23E-04	Methanol	Water	0,00092317
213	Cypermethrin	Air	8,45E-04	Cypermethrin	Air	0,00084547
214	Pendimethalin	Air	7,68E-04	Pendimethalin	Air	0,00076803
215	Methane, trichlorofluoro-, CFC-11	Air	7,56E-04	Methane, trichlorofluoro-, CFC-11	Air	0,00075592
216	Acenaphthene	Air	7,37E-04	Acenaphthene	Air	0,00073729
217	Ethanol	Water	5,68E-04	Ethanol	Water	0,00056797
218	Propene	Water	5,37E-04	Propene	Water	0,00053714
219	Flumetsulam	Air	4,72E-04	Flumetsulam	Air	0,000472
220	Styrene	Air	3,87E-04	Styrene	Air	0,00038692
221	m-Xylene	Water	2,94E-04	m-Xylene	Water	0,00029392
222	t-Butyl methyl ether	Water	2,46E-04	t-Butyl methyl ether	Water	0,00024597
223	Dicamba	Air	2,32E-04	Dicamba	Air	0,0002319
224	Acetic acid	Water	2,24E-04	Acetic acid	Water	0,00022352
225	Dimethylamine	Water	2,02E-04	Dimethylamine	Water	0,00020239
226	o-Xylene	Water	1,99E-04	o-Xylene	Water	0,00019923
227	Cyfluthrin	Air	1,97E-04	Cyfluthrin	Air	0,0001966
228	Imazethapyr	Air	1,91E-04	Imazethapyr	Air	0,00019122
229	Propiconazole	Air	1,78E-04	Propiconazole	Air	0,00017842
230	Ethyl acetate	Water	1,38E-04	Ethyl acetate	Water	0,0001381
231	Butene	Water	1,22E-04	Butene	Water	0,00012229
232	Ethene, chloro-	Water	1,18E-04	Ethene, chloro-	Water	0,00011836
233	Fenoxaprop ethyl ester	Soil	1,14E-04	Fenoxaprop ethyl ester	Soil	0,00011447
234	Bentazone	Air	1,12E-04	Bentazone	Air	0,00011189
235	Triasulfuron	Soil	1,11E-04	Triasulfuron	Soil	0,00011065
236	Sulfosulfuron	Soil	1,10E-04	Sulfosulfuron	Soil	1,10E-04
237	Butadiene	Air	6,13E-05	Butadiene	Air	6,13E-05
238	Methane, dichlorofluoro-, HCFC-21	Air	6,08E-05	Methane, dichlorofluoro-, HCFC-21	Air	6,08E-05
239	Permethrin	Air	5,13E-05	Permethrin	Air	5,13E-05
240	Acenaphthene	Water	4,07E-05	Acenaphthene	Water	4,07E-05
241	Acetone	Water	3,84E-05	Acetone	Water	3,84E-05
242	Heptane	Air	2,66E-05	Heptane	Air	2,66E-05
243	Methane, bromo-, Halon	Air	2,42E-05	Methane, bromo-, Halon	Air	2,42E-05

	1001			Halon 1001		
244	Quizalofop ethyl ester	Air	1,63E-05	Quizalofop ethyl ester	Air	1,63E-05
245	Bromuconazole	Soil	1,39E-05	Bromuconazole	Soil	1,39E-05
246	Aluminium	Water	9,38E-06	Aluminium	Water	9,38E-06
247	Mecoprop	Soil	6,00E-06	Mecoprop	Soil	6,00E-06
248	Chlorsulfuron	Soil	5,20E-06	Chlorsulfuron	Soil	5,20E-06
249	Propanal	Water	4,38E-06	Propanal	Water	4,38E-06
250	Sethoxydim	Air	1,86E-06	Sethoxydim	Air	1,86E-06
251	Triallate	Soil	5,24E-07	Triallate	Soil	5,24E-07
252	Barium	Water	1,46E-07	Barium	Water	1,46E-07
253	Flumiclorac-pentyl	Soil	7,27E-08	Flumiclorac-pentyl	Soil	7,27E-08
254	Flumiclorac-pentyl	Air	6,05E-08	Flumiclorac-pentyl	Air	6,05E-08
255	Asulam	Soil	5,14E-08	Asulam	Soil	5,14E-08
256	Acenaphthylene	Water	7,95E-09	Acenaphthylene	Water	7,95E-09
257	Mercury	Water	3,14E-09	Mercury	Water	3,14E-09
258	Antimony	Water	2,89E-09	Antimony	Water	2,89E-09
259	Ethane, 1,1,1-trichloro-, HCFC-140	Water	8,22E-10	Ethane, 1,1,1-trichloro-, HCFC-140	Water	8,22E-10
260	Cadmium	Water	6,29E-10	Cadmium	Water	6,29E-10
261	Cobalt	Water	1,49E-10	Cobalt	Water	1,49E-10
262	Triethylene glycol	Water	3,12E-12	Triethylene glycol	Water	3,12E-12
263	Mercury	Soil	-2,49E+05	Mercury	Soil	-2,49E+05

Tableau C.25 Ranking and contribution (PDF.m<sup>2</sup>.yr) of the 263 substances that contribute the most to terrestrial ecotoxicity impact score for the TS\_min and TS\_max scenarios

No	TS_min			TS_max		
1	Aluminium	Soil	6,15E+08	Aluminium	Soil	6,15E+08
2	Aluminium	Air	2,78E+08	Aluminium	Air	2,78E+08
3	Copper	Air	8,22E+07	Copper	Air	8,22E+07
4	Zinc	Air	8,22E+07	Zinc	Air	8,22E+07
5	Copper	Soil	3,00E+07	Copper	Soil	3,00E+07
6	Chromium	Air	2,61E+07	Chromium	Air	2,61E+07
7	Nickel	Air	2,56E+07	Nickel	Air	2,56E+07
8	Chromium	Soil	1,64E+07	Chromium	Soil	1,64E+07
9	Arsenic	Air	1,01E+07	Arsenic	Air	1,01E+07
10	Lead	Air	8,50E+06	Lead	Air	8,50E+06
11	Nickel	Soil	7,24E+06	Nickel	Soil	7,24E+06
12	Cadmium	Air	6,21E+06	<b>Zinc</b>	<b>Soil</b>	<b>6,77E+06</b>
13	Aldicarb	Soil	4,04E+06	Cadmium	Air	6,21E+06
14	Cadmium	Soil	3,04E+06	Aldicarb	Soil	4,04E+06



15	Mercury	Air	2,93E+06	Cadmium	Soil	3,04E+06
16	Lead	Soil	2,04E+06	Mercury	Air	2,93E+06
17	Arsenic	Soil	1,70E+06	Lead	Soil	2,04E+06
18	Chromium VI	Soil	1,30E+06	Arsenic	Soil	1,70E+06
19	Chromium VI	Air	8,90E+05	Chromium VI	Soil	1,30E+06
20	Cobalt	Soil	8,61E+05	Chromium VI	Air	8,90E+05
21	Cobalt	Air	5,25E+05	Cobalt	Soil	8,61E+05
22	Metamitron	Soil	1,39E+05	Cobalt	Air	5,25E+05
23	Glyphosate	Soil	1,02E+05	Metamitron	Soil	1,39E+05
24	Fipronil	Soil	8,98E+04	Glyphosate	Soil	1,02E+05
25	Aldrin	Soil	5,85E+04	Fipronil	Soil	8,98E+04
26	Antimony	Air	5,60E+04	Aldrin	Soil	5,85E+04
27	Ammonia	Air	4,03E+04	Antimony	Air	5,60E+04
28	Selenium	Air	3,83E+04	Ammonia	Air	4,03E+04
29	Diclotophos	Soil	2,59E+04	Selenium	Air	3,83E+04
30	Diuron	Soil	2,55E+04	Diclotophos	Soil	2,59E+04
31	Phenol, pentachloro-	Soil	2,33E+04	Diuron	Soil	2,55E+04
32	Barium	Soil	1,50E+04	Phenol, pentachloro-	Soil	2,33E+04
33	Chlorothalonil	Soil	1,28E+04	Barium	Soil	1,50E+04
34	Chlorpyrifos	Soil	9,21E+03	Chlorothalonil	Soil	1,28E+04
35	Barium	Air	3,61E+03	Chlorpyrifos	Soil	9,21E+03
36	Ethofumesate	Soil	2,76E+03	Barium	Air	3,61E+03
37	Paraquat	Soil	2,69E+03	Ethofumesate	Soil	2,76E+03
38	Ethephon	Soil	2,59E+03	Paraquat	Soil	2,69E+03
39	Mancozeb	Soil	2,40E+03	Ethephon	Soil	2,59E+03
40	Acephate	Soil	1,89E+03	Mancozeb	Soil	2,40E+03
41	Cypermethrin	Soil	1,74E+03	Acephate	Soil	1,89E+03
42	Carbofuran	Soil	1,22E+03	Cypermethrin	Soil	1,74E+03
43	Metolachlor	Soil	1,14E+03	Carbofuran	Soil	1,22E+03
44	Carbendazim	Soil	9,99E+02	Metolachlor	Soil	1,14E+03
45	Hydrocarbons, aromatic	Air	6,75E+02	Carbendazim	Soil	9,99E+02
46	Mepiquat chloride	Soil	6,33E+02	Hydrocarbons, aromatic	Air	6,75E+02
47	Prometryn	Soil	4,97E+02	Mepiquat chloride	Soil	6,33E+02
48	Atrazine	Soil	4,02E+02	Prometryn	Soil	4,97E+02
49	Acetic acid	Air	3,69E+02	Atrazine	Soil	4,02E+02
50	Formaldehyde	Air	2,87E+02	Acetic acid	Air	3,69E+02
51	Isoproturon	Soil	2,65E+02	Formaldehyde	Air	2,87E+02
52	Linuron	Soil	1,96E+02	Isoproturon	Soil	2,65E+02
53	Metribuzin	Soil	1,80E+02	Linuron	Soil	1,96E+02
54	Carbetamide	Soil	1,40E+02	Metribuzin	Soil	1,80E+02
55	Thiram	Soil	1,36E+02	Carbetamide	Soil	1,40E+02

56	Pyrithiobac sodium salt	Soil	7,80E+01	Thiram	Soil	1,36E+02
57	Dimethoate	Soil	7,79E+01	Pyrithiobac sodium salt	Soil	7,80E+01
58	Phenol, pentachloro-	Air	7,50E+01	Dimethoate	Soil	7,79E+01
59	Thidiazuron	Soil	5,51E+01	Phenol, pentachloro-	Air	7,50E+01
60	Acrolein	Air	4,77E+01	Thidiazuron	Soil	5,51E+01
61	Trifluralin	Soil	4,69E+01	Acrolein	Air	4,77E+01
62	Methane, tetrafluoro-, CFC-14	Air	4,52E+01	Trifluralin	Soil	4,69E+01
63	Benzo(a)pyrene	Air	4,42E+01	Methane, tetrafluoro-, CFC-14	Air	4,52E+01
64	Cyfluthrin	Soil	4,30E+01	Benzo(a)pyrene	Air	4,42E+01
65	Sulfentrazone	Soil	4,19E+01	Cyfluthrin	Soil	4,30E+01
66	Antimony	Soil	2,84E+01	Sulfentrazone	Soil	4,19E+01
67	Selenium	Soil	2,82E+01	Antimony	Soil	2,84E+01
68	Lambda-cyhalothrin	Soil	2,67E+01	Selenium	Soil	2,82E+01
69	Endosulfan	Soil	2,58E+01	Lambda-cyhalothrin	Soil	2,67E+01
70	Pendimethalin	Soil	2,50E+01	Endosulfan	Soil	2,58E+01
71	Acetochlor	Soil	2,34E+01	Pendimethalin	Soil	2,50E+01
72	PAH, polycyclic aromatic hydrocarbons	Air	2,21E+01	Acetochlor	Soil	2,34E+01
73	Parathion	Soil	1,90E+01	PAH, polycyclic aromatic hydrocarbons	Air	2,21E+01
74	2,4-D	Soil	1,70E+01	Parathion	Soil	1,90E+01
75	Dimethenamid	Soil	1,46E+01	2,4-D	Soil	1,70E+01
76	Phenol	Air	8,65E+00	Dimethenamid	Soil	1,46E+01
77	Clomazone	Soil	5,32E+00	Phenol	Air	8,65E+00
78	Ethane, 1,2-dichloro-	Air	4,49E+00	Clomazone	Soil	5,32E+00
79	Ethane, 1,1,1,2-tetrafluoro-, HFC-134a	Air	4,09E+00	Ethane, 1,2-dichloro-	Air	4,49E+00
80	Benzene, 1,2-dichloro-	Water	3,76E+00	Ethane, 1,1,1,2-tetrafluoro-, HFC-134a	Air	4,09E+00
81	Hydrocarbons, C10-C50, non aromatic	Water	3,61E+00	Benzene, 1,2-dichloro-	Water	3,76E+00
82	Ethyl acetate	Air	3,56E+00	Hydrocarbons, C10-C50, non aromatic	Water	3,61E+00
83	Glyphosate	Air	3,39E+00	Ethyl acetate	Air	3,56E+00
84	Benzene, chloro-	Water	3,03E+00	Glyphosate	Air	3,39E+00
85	Tebuconazole	Soil	2,99E+00	Benzene, chloro-	Water	3,03E+00
86	Methyl ethyl ketone	Air	2,84E+00	Tebuconazole	Soil	2,99E+00
87	Iprodione	Soil	2,69E+00	Methyl ethyl ketone	Air	2,84E+00
88	Propane	Air	2,60E+00	Iprodione	Soil	2,69E+00
89	Benzene	Air	2,25E+00	Propane	Air	2,60E+00

90	Methanol	Air	1,51E+00	Benzene	Air	2,25E+00
91	Acetaldehyde	Air	1,40E+00	Methanol	Air	1,51E+00
92	Simazine	Soil	1,24E+00	Acetaldehyde	Air	1,40E+00
93	Imazamox	Soil	1,24E+00	Simazine	Soil	1,24E+00
94	Butane	Air	1,21E+00	Imazamox	Soil	1,24E+00
95	Isoxaflutole	Soil	1,16E+00	Butane	Air	1,21E+00
96	Ethane, 1,1,2-trichloro-1,2,2-trifluoro-, CFC-113	Air	1,07E+00	Isoxaflutole	Soil	1,16E+00
97	Napropamide	Soil	9,55E-01	Ethane, 1,1,2-trichloro-1,2,2-trifluoro-, CFC-113	Air	1,07E+00
98	Malathion	Soil	9,15E-01	Napropamide	Soil	9,55E-01
99	Carbaryl	Soil	8,92E-01	Malathion	Soil	9,15E-01
100	Tribufos	Soil	8,84E-01	Carbaryl	Soil	8,92E-01
101	Rimsulfuron	Soil	8,72E-01	Tribufos	Soil	8,84E-01
102	Alachlor	Soil	7,97E-01	Rimsulfuron	Soil	8,72E-01
103	Ethene	Air	7,85E-01	Alachlor	Soil	7,97E-01
104	Toluene	Air	7,66E-01	Ethene	Air	7,85E-01
105	Azoxystrobin	Soil	6,53E-01	Toluene	Air	7,66E-01
106	Pentane	Air	6,52E-01	Azoxystrobin	Soil	6,53E-01
107	Terbufos	Soil	6,35E-01	Pentane	Air	6,52E-01
108	Acetone	Air	5,78E-01	Terbufos	Soil	6,35E-01
109	Benomyl	Soil	5,60E-01	Acetone	Air	5,78E-01
110	Vinclozolin	Soil	4,10E-01	Benomyl	Soil	5,60E-01
111	Chloroform	Air	3,97E-01	Vinclozolin	Soil	4,10E-01
112	Methane, chlorodifluoro-, HCFC-22	Air	2,98E-01	Chloroform	Air	3,97E-01
113	Pirimicarb	Soil	2,87E-01	Methane, chlorodifluoro-, HCFC-22	Air	2,98E-01
114	Trinexapac-ethyl	Soil	2,59E-01	Pirimicarb	Soil	2,87E-01
115	Dicamba	Soil	2,58E-01	Trinexapac-ethyl	Soil	2,59E-01
116	Hydrocarbons, aromatic	Water	2,42E-01	Dicamba	Soil	2,58E-01
117	Metribuzin	Air	2,11E-01	Hydrocarbons, aromatic	Water	2,42E-01
118	Flumetsulam	Soil	1,89E-01	Metribuzin	Air	2,11E-01
119	Methane, dichloro-, HCC-30	Air	1,76E-01	Flumetsulam	Soil	1,89E-01
120	m-Xylene	Air	1,60E-01	Methane, dichloro-, HCC-30	Air	1,76E-01
121	Ethalfuralin	Soil	1,57E-01	m-Xylene	Air	1,60E-01
122	Xylene	Air	1,51E-01	Ethalfuralin	Soil	1,57E-01
123	Flufenacet	Soil	1,31E-01	Xylene	Air	1,51E-01
124	Ioxynil	Soil	1,31E-01	Flufenacet	Soil	1,31E-01

125	Ethyne	Air	1,31E-01	Ioxynil	Soil	1,31E-01
126	Oxydemeton methyl	Soil	1,25E-01	Ethyne	Air	1,31E-01
127	Ethane, 1,2-dichloro-	Water	1,25E-01	Oxydemeton methyl	Soil	1,25E-01
128	Sulfentrazone	Air	1,13E-01	Ethane, 1,2-dichloro-	Water	1,25E-01
129	Methane, dichlorodifluoro-, CFC-12	Air	1,10E-01	Sulfentrazone	Air	1,13E-01
130	Methane, bromotrifluoro-, Halon 1301	Air	1,03E-01	Methane, dichlorodifluoro-, CFC-12	Air	1,10E-01
131	Thifensulfuron-methyl	Soil	1,02E-01	Methane, bromotrifluoro-, Halon 1301	Air	1,03E-01
132	Difenoconazole	Soil	9,74E-02	Thifensulfuron-methyl	Soil	1,02E-01
133	Metolachlor	Air	9,54E-02	Difenoconazole	Soil	9,74E-02
134	Paraquat	Air	9,40E-02	Metolachlor	Air	9,54E-02
135	Benzene, hexachloro-	Air	9,31E-02	Paraquat	Air	9,40E-02
136	Kresoxim-methyl	Soil	9,17E-02	Benzene, hexachloro-	Air	9,31E-02
137	Ethanol	Air	8,15E-02	Kresoxim-methyl	Soil	9,17E-02
138	Methane, dichloro-, HCC-30	Water	7,67E-02	Ethanol	Air	8,15E-02
139	Methane, tetrachloro-, CFC-10	Air	7,10E-02	Methane, dichloro-, HCC-30	Water	7,67E-02
140	Phenmedipham	Soil	6,99E-02	Methane, tetrachloro-, CFC-10	Air	7,10E-02
141	Fluroxypyr	Soil	6,64E-02	Phenmedipham	Soil	6,99E-02
142	Deltamethrin	Soil	6,49E-02	Fluroxypyr	Soil	6,64E-02
143	Tefluthrin	Soil	6,44E-02	Deltamethrin	Soil	6,49E-02
144	t-Butyl methyl ether	Air	6,02E-02	Tefluthrin	Soil	6,44E-02
145	Endothall	Soil	4,59E-02	t-Butyl methyl ether	Air	6,02E-02
146	Ethene, chloro-	Air	4,35E-02	Endothall	Soil	4,59E-02
147	Bromoxynil	Soil	4,20E-02	Ethene, chloro-	Air	4,35E-02
148	Benzene, ethyl-	Air	3,75E-02	Bromoxynil	Soil	4,20E-02
149	Cyprodinil	Soil	3,47E-02	Benzene, ethyl-	Air	3,75E-02
150	Propiconazole	Soil	3,20E-02	Cyprodinil	Soil	3,47E-02
151	Ethane, 1,1,1-trichloro-, HCFC-140	Air	2,94E-02	Propiconazole	Soil	3,20E-02
152	Imazethapyr	Soil	2,88E-02	Ethane, 1,1,1-trichloro-, HCFC-140	Air	2,94E-02
153	Prochloraz	Soil	2,57E-02	Imazethapyr	Soil	2,88E-02
154	Quizalofop ethyl ester	Soil	2,14E-02	Prochloraz	Soil	2,57E-02
155	Cyproconazole	Soil	2,13E-02	Quizalofop ethyl ester	Soil	2,14E-02
156	Benzene	Water	1,95E-02	Cyproconazole	Soil	2,13E-02
157	Sethoxydim	Soil	1,94E-02	Benzene	Water	1,95E-02

158	Metalaxil	Soil	1,90E-02	Sethoxydim	Soil	1,94E-02
159	Fenbuconazole	Soil	1,80E-02	Metalaxil	Soil	1,90E-02
160	Bifenthrin	Soil	1,64E-02	Fenbuconazole	Soil	1,80E-02
161	Bentazone	Soil	1,58E-02	Bifenthrin	Soil	1,64E-02
162	Carbaryl	Air	1,43E-02	Bentazone	Soil	1,58E-02
163	Chloroform	Water	1,30E-02	Carbaryl	Air	1,43E-02
164	Ethene, tetrachloro-	Air	1,27E-02	Chloroform	Water	1,30E-02
165	Toluene	Water	1,26E-02	Ethene, tetrachloro-	Air	1,27E-02
166	Chlorpyrifos	Air	1,19E-02	Toluene	Water	1,26E-02
167	Formaldehyde	Water	9,28E-03	Chlorpyrifos	Air	1,19E-02
168	Atrazine	Air	9,24E-03	Formaldehyde	Water	9,28E-03
169	Propene	Air	8,71E-03	Atrazine	Air	9,24E-03
170	Ethane, 1,1-difluoro-, HFC-152a	Air	8,70E-03	Propene	Air	8,71E-03
171	Hydrazine	Water	8,64E-03	Ethane, 1,1-difluoro-, HFC-152a	Air	8,70E-03
172	Benzene, 1,2-dichloro-	Air	7,74E-03	Hydrazine	Water	8,64E-03
173	Triadimenol	Soil	6,56E-03	Benzene, 1,2-dichloro-	Air	7,74E-03
174	PAH, polycyclic aromatic hydrocarbons	Water	6,55E-03	Triadimenol	Soil	6,56E-03
175	Methane, bromochlorodifluoro-, Halon 1211	Air	6,16E-03	PAH, polycyclic aromatic hydrocarbons	Water	6,55E-03
176	Chloridazon	Soil	6,16E-03	Methane, bromochlorodifluoro-, Halon 1211	Air	6,16E-03
177	Acetaldehyde	Water	5,59E-03	Chloridazon	Soil	6,16E-03
178	Thiodicarb	Soil	5,30E-03	Acetaldehyde	Water	5,59E-03
179	Dioxin, 2,3,7,8 Tetrachlorodibenzo-p-	Air	5,20E-03	Thiodicarb	Soil	5,30E-03
180	Polychlorinated biphenyls	Air	4,56E-03	Dioxin, 2,3,7,8 Tetrachlorodibenzo-p-	Air	5,20E-03
181	2,4-D	Air	4,50E-03	Polychlorinated biphenyls	Air	4,56E-03
182	2-Methyl-4-chlorophenoxyacetic acid	Soil	4,30E-03	2,4-D	Air	4,50E-03
183	Phenol	Water	4,25E-03	2-Methyl-4-chlorophenoxyacetic acid	Soil	4,30E-03
184	Azoxystrobin	Air	3,73E-03	Phenol	Water	4,25E-03
185	Diclofop-methyl	Soil	3,51E-03	Azoxystrobin	Air	3,73E-03
186	Parathion, methyl	Air	3,07E-03	Diclofop-methyl	Soil	3,51E-03

187	Benzene, pentachloro-	Air	2,98E-03	Parathion, methyl	Air	3,07E-03
188	Cyhalothrin, gamma-	Soil	2,91E-03	Benzene, pentachloro-	Air	2,98E-03
189	PAH, polycyclic aromatic hydrocarbons	Soil	2,85E-03	Cyhalothrin, gamma-	Soil	2,91E-03
190	Ethene	Water	2,75E-03	PAH, polycyclic aromatic hydrocarbons	Soil	2,85E-03
191	Butene	Air	2,75E-03	Ethene	Water	2,75E-03
192	Imazamox	Air	2,74E-03	Butene	Air	2,75E-03
193	Cyhalothrin, gamma-	Air	2,69E-03	Imazamox	Air	2,74E-03
194	Parathion, methyl	Soil	2,58E-03	Cyhalothrin, gamma-	Air	2,69E-03
195	Ethane, 2-chloro-1,1,1,2-tetrafluoro-, HCFC-124	Air	2,39E-03	Parathion, methyl	Soil	2,58E-03
196	Thiodicarb	Air	2,34E-03	Ethane, 2-chloro-1,1,1,2-tetrafluoro-, HCFC-124	Air	2,39E-03
197	Acephate	Air	2,24E-03	Thiodicarb	Air	2,34E-03
198	Alachlor	Air	2,20E-03	Acephate	Air	2,24E-03
199	Permethrin	Soil	2,11E-03	Alachlor	Air	2,20E-03
200	Prosulfuron	Soil	1,98E-03	Permethrin	Soil	2,11E-03
201	Xylene	Water	1,92E-03	Prosulfuron	Soil	1,98E-03
202	Bifenox	Soil	1,80E-03	Xylene	Water	1,92E-03
203	Imazapyr	Soil	1,77E-03	Bifenox	Soil	1,80E-03
204	Hexane	Air	1,68E-03	Imazapyr	Soil	1,77E-03
205	Benzene, ethyl-	Water	1,43E-03	Hexane	Air	1,68E-03
206	Flufenacet	Air	1,38E-03	Benzene, ethyl-	Water	1,43E-03
207	Trifluralin	Air	1,31E-03	Flufenacet	Air	1,38E-03
208	o-Xylene	Air	1,16E-03	Trifluralin	Air	1,31E-03
209	Propanal	Air	1,15E-03	o-Xylene	Air	1,16E-03
210	Fludioxonil	Soil	9,69E-04	Propanal	Air	1,15E-03
211	Methanol	Water	9,23E-04	Fludioxonil	Soil	9,69E-04
212	Cypermethrin	Air	8,45E-04	Methanol	Water	9,23E-04
213	Pendimethalin	Air	7,68E-04	Cypermethrin	Air	8,45E-04
214	Methane, trichlorofluoro-, CFC-11	Air	7,56E-04	Pendimethalin	Air	7,68E-04
215	Acenaphthene	Air	7,37E-04	Methane, trichlorofluoro-, CFC-11	Air	7,56E-04
216	Ethanol	Water	5,68E-04	Acenaphthene	Air	7,37E-04
217	Propene	Water	5,37E-04	Ethanol	Water	5,68E-04
218	Flumetsulam	Air	4,72E-04	Propene	Water	5,37E-04
219	Styrene	Air	3,87E-04	Flumetsulam	Air	4,72E-04
220	m-Xylene	Water	2,94E-04	Styrene	Air	3,87E-04
221	t-Butyl methyl ether	Water	2,46E-04	m-Xylene	Water	2,94E-04

222	Dicamba	Air	2,32E-04	t-Butyl methyl ether	Water	2,46E-04
223	Acetic acid	Water	2,24E-04	Dicamba	Air	2,32E-04
224	Dimethylamine	Water	2,02E-04	Acetic acid	Water	2,24E-04
225	o-Xylene	Water	1,99E-04	Dimethylamine	Water	2,02E-04
226	Cyfluthrin	Air	1,97E-04	o-Xylene	Water	1,99E-04
227	Imazethapyr	Air	1,91E-04	Cyfluthrin	Air	1,97E-04
228	Propiconazole	Air	1,78E-04	Imazethapyr	Air	1,91E-04
229	Ethyl acetate	Water	1,38E-04	Propiconazole	Air	1,78E-04
230	Butene	Water	1,22E-04	Ethyl acetate	Water	1,38E-04
231	Ethene, chloro-	Water	1,18E-04	Butene	Water	1,22E-04
232	Fenoxaprop ethyl ester	Soil	1,14E-04	Ethene, chloro-	Water	1,18E-04
233	Bentazone	Air	1,12E-04	Fenoxaprop ethyl ester	Soil	1,14E-04
234	Triasulfuron	Soil	1,11E-04	Bentazone	Air	1,12E-04
235	Sulfosulfuron	Soil	1,10E-04	Triasulfuron	Soil	1,11E-04
236	Butadiene	Air	6,13E-05	Sulfosulfuron	Soil	1,10E-04
237	Methane, dichlorofluoro-, HCFC-21	Air	6,08E-05	Butadiene	Air	6,13E-05
238	Permethrin	Air	5,13E-05	Methane, dichlorofluoro-, HCFC-21	Air	6,08E-05
239	Acenaphthene	Water	4,07E-05	Permethrin	Air	5,13E-05
240	Acetone	Water	3,84E-05	Acenaphthene	Water	4,07E-05
241	Heptane	Air	2,66E-05	Acetone	Water	3,84E-05
242	Methane, bromo-, Halon 1001	Air	2,42E-05	Heptane	Air	2,66E-05
243	Quizalofop ethyl ester	Air	1,63E-05	Methane, bromo-, Halon 1001	Air	2,42E-05
244	Bromuconazole	Soil	1,39E-05	Quizalofop ethyl ester	Air	1,63E-05
245	Aluminium	Water	9,38E-06	Bromuconazole	Soil	1,39E-05
246	Mecoprop	Soil	6,00E-06	Aluminium	Water	9,38E-06
247	Chlorsulfuron	Soil	5,20E-06	Mecoprop	Soil	6,00E-06
248	Propanal	Water	4,38E-06	Chlorsulfuron	Soil	5,20E-06
249	Sethoxydim	Air	1,86E-06	Propanal	Water	4,38E-06
250	Triallate	Soil	5,24E-07	Sethoxydim	Air	1,86E-06
251	Barium	Water	1,46E-07	Triallate	Soil	5,24E-07
252	Flumiclorac-pentyl	Soil	7,27E-08	Barium	Water	1,46E-07
253	Flumiclorac-pentyl	Air	6,05E-08	Flumiclorac-pentyl	Soil	7,27E-08
254	Asulam	Soil	5,14E-08	Asulam	Air	6,05E-08
255	Zinc	Soil	2,91E-08	Flumiclorac-pentyl	Soil	5,14E-08
256	Acenaphthylene	Water	7,95E-09	Acenaphthylene	Water	7,95E-09
257	Mercury	Water	3,14E-09	Mercury	Water	3,14E-09
258	Antimony	Water	2,89E-09	Antimony	Water	2,89E-09

259	Ethane, 1,1,1-trichloro-, HCFC-140	Water	8,22E-10	Ethane, 1,1,1-trichloro-, HCFC-140	Water	8,22E-10
260	Cadmium	Water	6,29E-10	Cadmium	Water	6,29E-10
261	Cobalt	Water	1,49E-10	Cobalt	Water	1,49E-10
262	Triethylene glycol	Water	3,12E-12	Triethylene glycol	Water	3,12E-12
263	Mercury	Soil	-2,49E+05	Mercury	Soil	-2,49E+05

Tableau C.26 Ranking and contribution (PDF.m<sup>2</sup>.yr) of the 263 substances that contribute the most to terrestrial ecotoxicity impact score for the QC\_TS\_min and QC\_TS\_max scenarios

No	QC_TS_min			QC_TS_max		
1	Aluminium	Soil	6,15E+08	Aluminium	Soil	6,15E+08
2	Aluminium	Air	2,78E+08	Aluminium	Air	2,78E+08
3	Copper	Air	8,22E+07	Copper	Air	8,22E+07
4	Zinc	Air	8,22E+07	Zinc	Air	8,22E+07
5	Copper	Soil	3,00E+07	Copper	Soil	3,00E+07
6	Chromium	Air	2,61E+07	Chromium	Air	2,61E+07
7	Nickel	Air	2,56E+07	Nickel	Air	2,56E+07
8	Chromium	Soil	1,64E+07	Chromium	Soil	1,64E+07
9	Arsenic	Air	1,01E+07	Arsenic	Air	1,01E+07
10	Lead	Air	8,50E+06	Lead	Air	8,50E+06
11	Nickel	Soil	7,24E+06	Nickel	Soil	7,24E+06
12	Cadmium	Air	6,21E+06	<b>Zinc</b>	<b>Soil</b>	<b>6,77E+06</b>
13	Aldicarb	Soil	4,04E+06	Cadmium	Air	6,21E+06
14	Cadmium	Soil	3,04E+06	Aldicarb	Soil	4,04E+06
15	Mercury	Air	2,93E+06	Cadmium	Soil	3,04E+06
16	Lead	Soil	2,04E+06	Mercury	Air	2,93E+06
17	Arsenic	Soil	1,70E+06	Lead	Soil	2,04E+06
18	Chromium VI	Soil	1,30E+06	Arsenic	Soil	1,70E+06
19	Chromium VI	Air	8,90E+05	Chromium VI	Soil	1,30E+06
20	Cobalt	Soil	8,61E+05	Chromium VI	Air	8,90E+05
21	Cobalt	Air	5,25E+05	Cobalt	Soil	8,61E+05
22	Metamitron	Soil	1,39E+05	Cobalt	Air	5,25E+05
23	Glyphosate	Soil	1,02E+05	Metamitron	Soil	1,39E+05
24	Fipronil	Soil	8,98E+04	Glyphosate	Soil	1,02E+05
25	Aldrin	Soil	5,85E+04	Fipronil	Soil	8,98E+04
26	Antimony	Air	5,60E+04	Aldrin	Soil	5,85E+04
27	Ammonia	Air	4,03E+04	Antimony	Air	5,60E+04
28	Selenium	Air	3,83E+04	Ammonia	Air	4,03E+04
29	Diclotophos	Soil	2,59E+04	Selenium	Air	3,83E+04
30	Diuron	Soil	2,55E+04	Diclotophos	Soil	2,59E+04



31	Phenol, pentachloro-	Soil	2,33E+04	Diuron	Soil	2,55E+04
32	Barium	Soil	1,50E+04	Phenol, pentachloro-	Soil	2,33E+04
33	Chlorothalonil	Soil	1,28E+04	Barium	Soil	1,50E+04
34	Chlorpyrifos	Soil	9,21E+03	Chlorothalonil	Soil	1,28E+04
35	Barium	Air	3,61E+03	Chlorpyrifos	Soil	9,21E+03
36	Ethofumesate	Soil	2,76E+03	Barium	Air	3,61E+03
37	Paraquat	Soil	2,69E+03	Ethofumesate	Soil	2,76E+03
38	Ethephon	Soil	2,59E+03	Paraquat	Soil	2,69E+03
39	Mancozeb	Soil	2,40E+03	Ethephon	Soil	2,59E+03
40	Acephate	Soil	1,89E+03	Mancozeb	Soil	2,40E+03
41	Cypermethrin	Soil	1,74E+03	Acephate	Soil	1,89E+03
42	Carbofuran	Soil	1,22E+03	Cypermethrin	Soil	1,74E+03
43	Metolachlor	Soil	1,14E+03	Carbofuran	Soil	1,22E+03
44	Carbendazim	Soil	9,99E+02	Metolachlor	Soil	1,14E+03
45	Hydrocarbons, aromatic	Air	6,75E+02	Carbendazim	Soil	9,99E+02
46	Mepiquat chloride	Soil	6,33E+02	Hydrocarbons, aromatic	Air	6,75E+02
47	Prometryn	Soil	4,97E+02	Mepiquat chloride	Soil	6,33E+02
48	Atrazine	Soil	4,02E+02	Prometryn	Soil	4,97E+02
49	Acetic acid	Air	3,69E+02	Atrazine	Soil	4,02E+02
50	Formaldehyde	Air	2,87E+02	Acetic acid	Air	3,69E+02
51	Isoproturon	Soil	2,65E+02	Formaldehyde	Air	2,87E+02
52	Linuron	Soil	1,96E+02	Isoproturon	Soil	2,65E+02
53	Metribuzin	Soil	1,80E+02	Linuron	Soil	1,96E+02
54	Carbetamide	Soil	1,40E+02	Metribuzin	Soil	1,80E+02
55	Thiram	Soil	1,36E+02	Carbetamide	Soil	1,40E+02
56	Pyrithiobac sodium salt	Soil	7,80E+01	Thiram	Soil	1,36E+02
57	Dimethoate	Soil	7,79E+01	Pyrithiobac sodium salt	Soil	7,80E+01
58	Phenol, pentachloro-	Air	7,50E+01	Dimethoate	Soil	7,79E+01
59	Thidiazuron	Soil	5,51E+01	Phenol, pentachloro-	Air	7,50E+01
60	Acrolein	Air	4,77E+01	Thidiazuron	Soil	5,51E+01
61	Trifluralin	Soil	4,69E+01	Acrolein	Air	4,77E+01
62	Methane, tetrafluoro-, CFC-14	Air	4,52E+01	Trifluralin	Soil	4,69E+01
63	Benzo(a)pyrene	Air	4,42E+01	Methane, tetrafluoro-, CFC-14	Air	4,52E+01
64	Cyfluthrin	Soil	4,30E+01	Benzo(a)pyrene	Air	4,42E+01
65	Sulfentrazone	Soil	4,19E+01	Cyfluthrin	Soil	4,30E+01
66	Antimony	Soil	2,84E+01	Sulfentrazone	Soil	4,19E+01
67	Selenium	Soil	2,82E+01	Antimony	Soil	2,84E+01
68	Lambda-cyhalothrin	Soil	2,67E+01	Selenium	Soil	2,82E+01
69	Endosulfan	Soil	2,58E+01	Lambda-cyhalothrin	Soil	2,67E+01

70	Pendimethalin	Soil	2,50E+01	Endosulfan	Soil	2,58E+01
71	Acetochlor	Soil	2,34E+01	Pendimethalin	Soil	2,50E+01
72	PAH, polycyclic aromatic hydrocarbons	Air	2,21E+01	Acetochlor	Soil	2,34E+01
73	Parathion	Soil	1,90E+01	PAH, polycyclic aromatic hydrocarbons	Air	2,21E+01
74	2,4-D	Soil	1,70E+01	Parathion	Soil	1,90E+01
75	Dimethenamid	Soil	1,46E+01	2,4-D	Soil	1,70E+01
76	Phenol	Air	8,65E+00	Dimethenamid	Soil	1,46E+01
77	Clomazone	Soil	5,32E+00	Phenol	Air	8,65E+00
78	Ethane, 1,2-dichloro-	Air	4,49E+00	Clomazone	Soil	5,32E+00
79	Ethane, 1,1,1,2-tetrafluoro-, HFC-134a	Air	4,09E+00	Ethane, 1,2-dichloro-	Air	4,49E+00
80	Benzene, 1,2-dichloro-	Water	3,76E+00	Ethane, 1,1,1,2-tetrafluoro-, HFC-134a	Air	4,09E+00
81	Hydrocarbons, C10-C50, non aromatic	Water	3,61E+00	Benzene, 1,2-dichloro-	Water	3,76E+00
82	Ethyl acetate	Air	3,56E+00	Hydrocarbons, C10-C50, non aromatic	Water	3,61E+00
83	Glyphosate	Air	3,39E+00	Ethyl acetate	Air	3,56E+00
84	Benzene, chloro-	Water	3,03E+00	Glyphosate	Air	3,39E+00
85	Tebuconazole	Soil	2,99E+00	Benzene, chloro-	Water	3,03E+00
86	Methyl ethyl ketone	Air	2,84E+00	Tebuconazole	Soil	2,99E+00
87	Iprodione	Soil	2,69E+00	Methyl ethyl ketone	Air	2,84E+00
88	Propane	Air	2,60E+00	Iprodione	Soil	2,69E+00
89	Benzene	Air	2,25E+00	Propane	Air	2,60E+00
90	Methanol	Air	1,51E+00	Benzene	Air	2,25E+00
91	Acetaldehyde	Air	1,40E+00	Methanol	Air	1,51E+00
92	Simazine	Soil	1,24E+00	Acetaldehyde	Air	1,40E+00
93	Imazamox	Soil	1,24E+00	Simazine	Soil	1,24E+00
94	Butane	Air	1,21E+00	Imazamox	Soil	1,24E+00
95	Isoxaflutole	Soil	1,16E+00	Butane	Air	1,21E+00
96	Ethane, 1,1,2-trichloro-1,2,2-trifluoro-, CFC-113	Air	1,07E+00	Isoxaflutole	Soil	1,16E+00
97	Napropamide	Soil	9,55E-01	Ethane, 1,1,2-trichloro-1,2,2-trifluoro-, CFC-113	Air	1,07E+00
98	Malathion	Soil	9,15E-01	Napropamide	Soil	9,55E-01
99	Carbaryl	Soil	8,92E-01	Malathion	Soil	9,15E-01
100	Tribufos	Soil	8,84E-01	Carbaryl	Soil	8,92E-01
101	Rimsulfuron	Soil	8,72E-01	Tribufos	Soil	8,84E-01
102	Alachlor	Soil	7,97E-01	Rimsulfuron	Soil	8,72E-01

103	Ethene	Air	7,85E-01	Alachlor	Soil	7,97E-01
104	Toluene	Air	7,66E-01	Ethene	Air	7,85E-01
105	Azoxystrobin	Soil	6,53E-01	Toluene	Air	7,66E-01
106	Pentane	Air	6,52E-01	Azoxystrobin	Soil	6,53E-01
107	Terbufos	Soil	6,35E-01	Pentane	Air	6,52E-01
108	Acetone	Air	5,78E-01	Terbufos	Soil	6,35E-01
109	Benomyl	Soil	5,60E-01	Acetone	Air	5,78E-01
110	<b>Zinc</b>	<b>Soil</b>	<b>4,20E-01</b>	Benomyl	Soil	5,60E-01
111	Vinclozolin	Soil	4,10E-01	Vinclozolin	Soil	4,10E-01
112	Chloroform	Air	3,97E-01	Chloroform	Air	3,97E-01
113	Methane, chlorodifluoro-, HCFC-22	Air	2,98E-01	Methane, chlorodifluoro-, HCFC-22	Air	2,98E-01
114	Pirimicarb	Soil	2,87E-01	Pirimicarb	Soil	2,87E-01
115	Trinexapac-ethyl	Soil	2,59E-01	Trinexapac-ethyl	Soil	2,59E-01
116	Dicamba	Soil	2,58E-01	Dicamba	Soil	2,58E-01
117	Hydrocarbons, aromatic	Water	2,42E-01	Hydrocarbons, aromatic	Water	2,42E-01
118	Metribuzin	Air	2,11E-01	Metribuzin	Air	2,11E-01
119	Flumetsulam	Soil	1,89E-01	Flumetsulam	Soil	1,89E-01
120	Methane, dichloro-, HCC-30	Air	1,76E-01	Methane, dichloro-, HCC-30	Air	1,76E-01
121	m-Xylene	Air	1,60E-01	m-Xylene	Air	1,60E-01
122	Ethalfuralin	Soil	1,57E-01	Ethalfuralin	Soil	1,57E-01
123	Xylene	Air	1,51E-01	Xylene	Air	1,51E-01
124	Flufenacet	Soil	1,31E-01	Flufenacet	Soil	1,31E-01
125	Ioxynil	Soil	1,31E-01	Ioxynil	Soil	1,31E-01
126	Ethyne	Air	1,31E-01	Ethyne	Air	1,31E-01
127	Oxydemeton methyl	Soil	1,25E-01	Oxydemeton methyl	Soil	1,25E-01
128	Ethane, 1,2-dichloro-	Water	1,25E-01	Ethane, 1,2-dichloro-	Water	1,25E-01
129	Sulfentrazone	Air	1,13E-01	Sulfentrazone	Air	1,13E-01
130	Methane, dichlorodifluoro-, CFC-12	Air	1,10E-01	Methane, dichlorodifluoro-, CFC-12	Air	1,10E-01
131	Methane, bromotrifluoro-, Halon 1301	Air	1,03E-01	Methane, bromotrifluoro-, Halon 1301	Air	1,03E-01
132	Thifensulfuron-methyl	Soil	1,02E-01	Thifensulfuron-methyl	Soil	1,02E-01
133	Difenoconazole	Soil	9,74E-02	Difenoconazole	Soil	9,74E-02
134	Metolachlor	Air	9,54E-02	Metolachlor	Air	9,54E-02
135	Paraquat	Air	9,40E-02	Paraquat	Air	9,40E-02
136	Benzene, hexachloro-	Air	9,31E-02	Benzene, hexachloro-	Air	9,31E-02

137	Kresoxim-methyl	Soil	9,17E-02	Kresoxim-methyl	Soil	9,17E-02
138	Ethanol	Air	8,15E-02	Ethanol	Air	8,15E-02
139	Methane, dichloro-, HCC-30	Water	7,67E-02	Methane, dichloro-, HCC-30	Water	7,67E-02
140	Methane, tetrachloro-, CFC-10	Air	7,10E-02	Methane, tetrachloro-, CFC-10	Air	7,10E-02
141	Phenmedipham	Soil	6,99E-02	Phenmedipham	Soil	6,99E-02
142	Fluroxypyr	Soil	6,64E-02	Fluroxypyr	Soil	6,64E-02
143	Deltamethrin	Soil	6,49E-02	Deltamethrin	Soil	6,49E-02
144	Tefluthrin	Soil	6,44E-02	Tefluthrin	Soil	6,44E-02
145	t-Butyl methyl ether	Air	6,02E-02	t-Butyl methyl ether	Air	6,02E-02
146	Endothall	Soil	4,59E-02	Endothall	Soil	4,59E-02
147	Ethene, chloro-	Air	4,35E-02	Ethene, chloro-	Air	4,35E-02
148	Bromoxynil	Soil	4,20E-02	Bromoxynil	Soil	4,20E-02
149	Benzene, ethyl-	Air	3,75E-02	Benzene, ethyl-	Air	3,75E-02
150	Cyprodinil	Soil	3,47E-02	Cyprodinil	Soil	3,47E-02
151	Propiconazole	Soil	3,20E-02	Propiconazole	Soil	3,20E-02
152	Ethane, 1,1,1-trichloro-, HCFC-140	Air	2,94E-02	Ethane, 1,1,1-trichloro-, HCFC-140	Air	2,94E-02
153	Imazethapyr	Soil	2,88E-02	Imazethapyr	Soil	2,88E-02
154	Prochloraz	Soil	2,57E-02	Prochloraz	Soil	2,57E-02
155	Quizalofop ethyl ester	Soil	2,14E-02	Quizalofop ethyl ester	Soil	2,14E-02
156	Cyproconazole	Soil	2,13E-02	Cyproconazole	Soil	2,13E-02
157	Benzene	Water	1,95E-02	Benzene	Water	1,95E-02
158	Sethoxydim	Soil	1,94E-02	Sethoxydim	Soil	1,94E-02
159	Metalaxil	Soil	1,90E-02	Metalaxil	Soil	1,90E-02
160	Fenbuconazole	Soil	1,80E-02	Fenbuconazole	Soil	1,80E-02
161	Bifenthrin	Soil	1,64E-02	Bifenthrin	Soil	1,64E-02
162	Bentazone	Soil	1,58E-02	Bentazone	Soil	1,58E-02
163	Carbaryl	Air	1,43E-02	Carbaryl	Air	1,43E-02
164	Chloroform	Water	1,30E-02	Chloroform	Water	1,30E-02
165	Ethene, tetrachloro-	Air	1,27E-02	Ethene, tetrachloro-	Air	1,27E-02
166	Toluene	Water	1,26E-02	Toluene	Water	1,26E-02
167	Chlorpyrifos	Air	1,19E-02	Chlorpyrifos	Air	1,19E-02
168	Formaldehyde	Water	9,28E-03	Formaldehyde	Water	9,28E-03
169	Atrazine	Air	9,24E-03	Atrazine	Air	9,24E-03
170	Propene	Air	8,71E-03	Propene	Air	8,71E-03
171	Ethane, 1,1-difluoro-, HFC-152a	Air	8,70E-03	Ethane, 1,1-difluoro-, HFC-152a	Air	8,70E-03
172	Hydrazine	Water	8,64E-03	Hydrazine	Water	8,64E-03
173	Benzene, 1,2-dichloro-	Air	7,74E-03	Benzene, 1,2-dichloro-	Air	7,74E-03
174	Triadimenol	Soil	6,56E-03	Triadimenol	Soil	6,56E-03

175	PAH, polycyclic aromatic hydrocarbons	Water	6,55E-03	PAH, polycyclic aromatic hydrocarbons	Water	6,55E-03
176	Methane, bromochlorodifluoro-, Halon 1211	Air	6,16E-03	Methane, bromochlorodifluoro-, Halon 1211	Air	6,16E-03
177	Chloridazon	Soil	6,16E-03	Chloridazon	Soil	6,16E-03
178	Acetaldehyde	Water	5,59E-03	Acetaldehyde	Water	5,59E-03
179	Thiodicarb	Soil	5,30E-03	Thiodicarb	Soil	5,30E-03
180	Dioxin, 2,3,7,8 Tetrachlorodibenzo-p-	Air	5,20E-03	Dioxin, 2,3,7,8 Tetrachlorodibenzo-p-	Air	5,20E-03
181	Polychlorinated biphenyls	Air	4,56E-03	Polychlorinated biphenyls	Air	4,56E-03
182	2,4-D	Air	4,50E-03	2,4-D	Air	4,50E-03
183	2-Methyl-4-chlorophenoxyacetic acid	Soil	4,30E-03	2-Methyl-4-chlorophenoxyacetic acid	Soil	4,30E-03
184	Phenol	Water	4,25E-03	Phenol	Water	4,25E-03
185	Azoxystrobin	Air	3,73E-03	Azoxystrobin	Air	3,73E-03
186	Diclofop-methyl	Soil	3,51E-03	Diclofop-methyl	Soil	3,51E-03
187	Parathion, methyl	Air	3,07E-03	Parathion, methyl	Air	3,07E-03
188	Benzene, pentachloro-	Air	2,98E-03	Benzene, pentachloro-	Air	2,98E-03
189	Cyhalothrin, gamma-	Soil	2,91E-03	Cyhalothrin, gamma-	Soil	2,91E-03
190	PAH, polycyclic aromatic hydrocarbons	Soil	2,85E-03	PAH, polycyclic aromatic hydrocarbons	Soil	2,85E-03
191	Ethene	Water	2,75E-03	Ethene	Water	2,75E-03
192	Butene	Air	2,75E-03	Butene	Air	2,75E-03
193	Imazamox	Air	2,74E-03	Imazamox	Air	2,74E-03
194	Cyhalothrin, gamma-	Air	2,69E-03	Cyhalothrin, gamma-	Air	2,69E-03
195	Parathion, methyl	Soil	2,58E-03	Parathion, methyl	Soil	2,58E-03
196	Ethane, 2-chloro-1,1,1,2-tetrafluoro-, HCFC-124	Air	2,39E-03	Ethane, 2-chloro-1,1,1,2-tetrafluoro-, HCFC-124	Air	2,39E-03
197	Thiodicarb	Air	2,34E-03	Thiodicarb	Air	2,34E-03
198	Acephate	Air	2,24E-03	Acephate	Air	2,24E-03
199	Alachlor	Air	2,20E-03	Alachlor	Air	2,20E-03
200	Permethrin	Soil	2,11E-03	Permethrin	Soil	2,11E-03
201	Prosulfuron	Soil	1,98E-03	Prosulfuron	Soil	1,98E-03
202	Xylene	Water	1,92E-03	Xylene	Water	1,92E-03
203	Bifenox	Soil	1,80E-03	Bifenox	Soil	1,80E-03
204	Imazapyr	Soil	1,77E-03	Imazapyr	Soil	1,77E-03
205	Hexane	Air	1,68E-03	Hexane	Air	1,68E-03
206	Benzene, ethyl-	Water	1,43E-03	Benzene, ethyl-	Water	1,43E-03

207	Flufenacet	Air	1,38E-03	Flufenacet	Air	1,38E-03
208	Trifluralin	Air	1,31E-03	Trifluralin	Air	1,31E-03
209	o-Xylene	Air	1,16E-03	o-Xylene	Air	1,16E-03
210	Propanal	Air	1,15E-03	Propanal	Air	1,15E-03
211	Fludioxonil	Soil	9,69E-04	Fludioxonil	Soil	9,69E-04
212	Methanol	Water	9,23E-04	Methanol	Water	9,23E-04
213	Cypermethrin	Air	8,45E-04	Cypermethrin	Air	8,45E-04
214	Pendimethalin	Air	7,68E-04	Pendimethalin	Air	7,68E-04
215	Methane, trichlorofluoro-, CFC-11	Air	7,56E-04	Methane, trichlorofluoro-, CFC-11	Air	7,56E-04
216	Acenaphthene	Air	7,37E-04	Acenaphthene	Air	7,37E-04
217	Ethanol	Water	5,68E-04	Ethanol	Water	5,68E-04
218	Propene	Water	5,37E-04	Propene	Water	5,37E-04
219	Flumetsulam	Air	4,72E-04	Flumetsulam	Air	4,72E-04
220	Styrene	Air	3,87E-04	Styrene	Air	3,87E-04
221	m-Xylene	Water	2,94E-04	m-Xylene	Water	2,94E-04
222	t-Butyl methyl ether	Water	2,46E-04	t-Butyl methyl ether	Water	2,46E-04
223	Dicamba	Air	2,32E-04	Dicamba	Air	2,32E-04
224	Acetic acid	Water	2,24E-04	Acetic acid	Water	2,24E-04
225	Dimethylamine	Water	2,02E-04	Dimethylamine	Water	2,02E-04
226	o-Xylene	Water	1,99E-04	o-Xylene	Water	1,99E-04
227	Cyfluthrin	Air	1,97E-04	Cyfluthrin	Air	1,97E-04
228	Imazethapyr	Air	1,91E-04	Imazethapyr	Air	1,91E-04
229	Propiconazole	Air	1,78E-04	Propiconazole	Air	1,78E-04
230	Ethyl acetate	Water	1,38E-04	Ethyl acetate	Water	1,38E-04
231	Butene	Water	1,22E-04	Butene	Water	1,22E-04
232	Ethene, chloro-	Water	1,18E-04	Ethene, chloro-	Water	1,18E-04
233	Fenoxaprop ethyl ester	Soil	1,14E-04	Fenoxaprop ethyl ester	Soil	1,14E-04
234	Bentazone	Air	1,12E-04	Bentazone	Air	1,12E-04
235	Triasulfuron	Soil	1,11E-04	Triasulfuron	Soil	1,11E-04
236	Sulfosulfuron	Soil	1,10E-04	Sulfosulfuron	Soil	1,10E-04
237	Butadiene	Air	6,13E-05	Butadiene	Air	6,13E-05
238	Methane, dichlorofluoro-, HCFC-21	Air	6,08E-05	Methane, dichlorofluoro-, HCFC-21	Air	6,08E-05
239	Permethrin	Air	5,13E-05	Permethrin	Air	5,13E-05
240	Acenaphthene	Water	4,07E-05	Acenaphthene	Water	4,07E-05
241	Acetone	Water	3,84E-05	Acetone	Water	3,84E-05
242	Heptane	Air	2,66E-05	Heptane	Air	2,66E-05
243	Methane, bromo-, Halon 1001	Air	2,42E-05	Methane, bromo-, Halon 1001	Air	2,42E-05
244	Quizalofop ethyl ester	Air	1,63E-05	Quizalofop ethyl ester	Air	1,63E-05

245	Bromuconazole	Soil	1,39E-05	Bromuconazole	Soil	1,39E-05
246	Aluminium	Water	9,38E-06	Aluminium	Water	9,38E-06
247	Mecoprop	Soil	6,00E-06	Mecoprop	Soil	6,00E-06
248	Chlorsulfuron	Soil	5,20E-06	Chlorsulfuron	Soil	5,20E-06
249	Propanal	Water	4,38E-06	Propanal	Water	4,38E-06
250	Sethoxydim	Air	1,86E-06	Sethoxydim	Air	1,86E-06
251	Triallate	Soil	5,24E-07	Triallate	Soil	5,24E-07
252	Barium	Water	1,46E-07	Barium	Water	1,46E-07
253	Flumiclorac-pentyl	Soil	7,27E-08	Flumiclorac-pentyl	Soil	7,27E-08
254	Flumiclorac-pentyl	Air	6,05E-08	Flumiclorac-pentyl	Air	6,05E-08
255	Asulam	Soil	5,14E-08	Asulam	Soil	5,14E-08
256	Acenaphthylene	Water	7,95E-09	Acenaphthylene	Water	7,95E-09
257	Mercury	Water	3,14E-09	Mercury	Water	3,14E-09
258	Antimony	Water	2,89E-09	Antimony	Water	2,89E-09
259	Ethane, 1,1,1-trichloro-, HCFC-140	Water	8,22E-10	Ethane, 1,1,1-trichloro-, HCFC-140	Water	8,22E-10
260	Cadmium	Water	6,29E-10	Cadmium	Water	6,29E-10
261	Cobalt	Water	1,49E-10	Cobalt	Water	1,49E-10
262	Triethylene glycol	Water	3,12E-12	Triethylene glycol	Water	3,12E-12
263	Mercury	Soil	-2,49E+05	Mercury	Soil	-2,49E+05